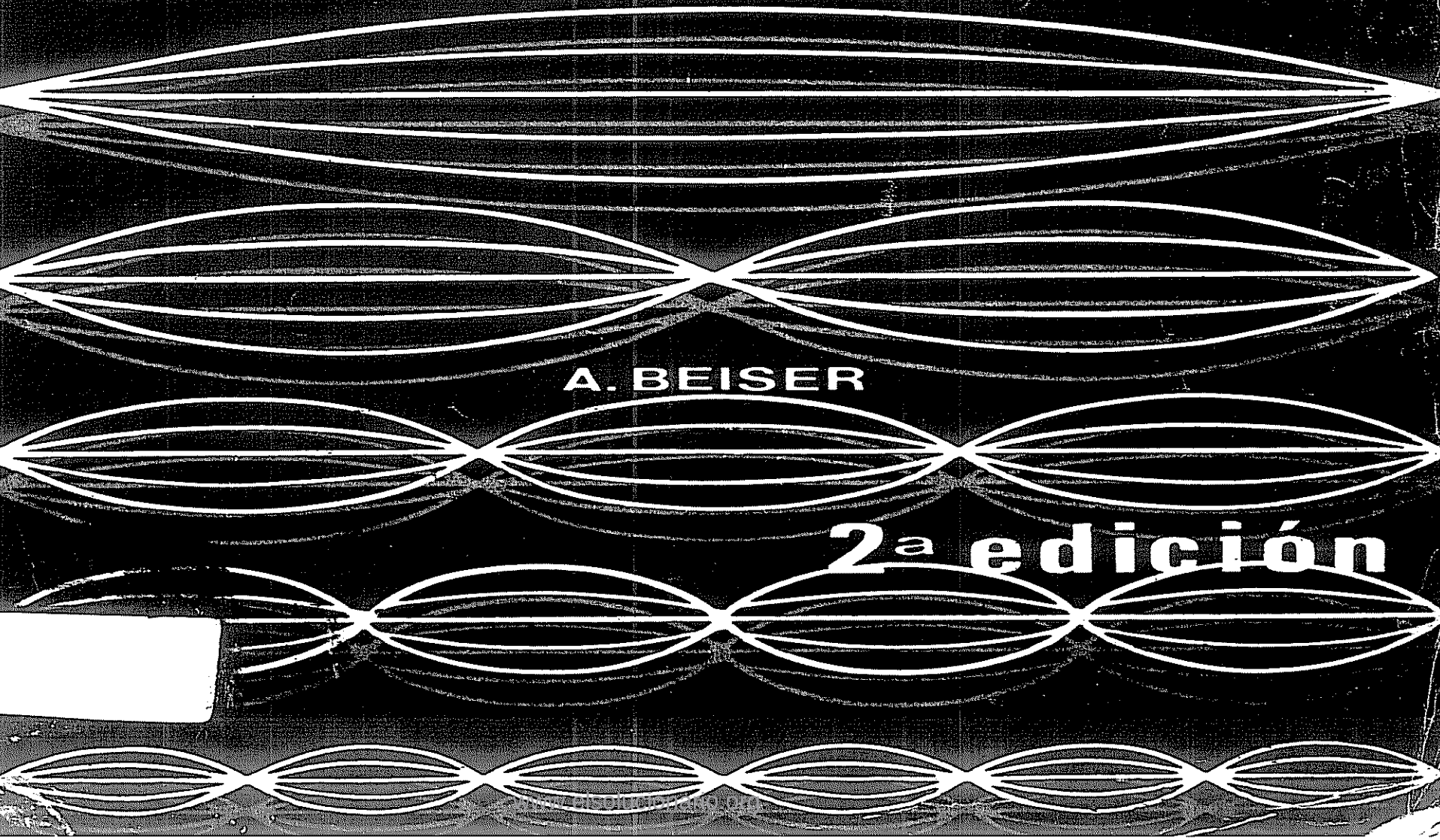
CONCEPTOS DE FISICA MODERNA



A. BEISER

2ª edición

Find your solutions manual here!

El Solucionario
www.elsolucionario.net

Subscribe RSS | Find on Facebook | Follow my Tweets

Encuentra en nuestra página los Textos Universitarios que necesitas!

Libros y Solucionarios en formato digital
El complemento ideal para estar preparados para los exámenes!

Los Solucionarios contienen TODOS los problemas del libro resueltos y explicados paso a paso de forma clara..

Visitanos para descargarlos GRATIS!
Descargas directas mucho más fáciles...

WWW.ELSOLUCIONARIO.NET

Biology
Investigación Operativa
Computer Science
Matemáticas Avanzadas
Physics
Estadística
Chemistry
Geometría
Math
Termodinámica
Cálculo
Electrónica
Circuitos
Business
Mechanical Engineering
Civil Engineering
Economía
Análisis Numérico
Ecuaciones Diferenciales
Electrical Engineering
Álgebra
Electromagnetismo

Find your solutions manual here!

BIBLIOTECA CENTRAL U.T.N. - F.R.C.

CONCEPTOS DE FISICA MODERNA

Arthur Beiser

Traducido por

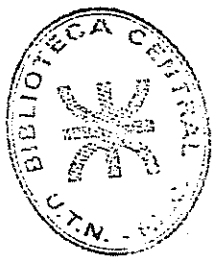
Arturo Nava Jaimes
Licenciado en Física
y Matemáticas

McGRAW-HILL

MÉXICO • BOGOTÁ • BUENOS AIRES • GUATEMALA • LISBOA • MADRID
NUEVA YORK • PANAMÁ • SAN JUAN • SANTIAGO • SÃO PAULO
AUCKLAND • HAMBURGO • JOHANNESBURGO • LONDRES • MONTREAL
NUEVA DELHI • PARÍS • SAN FRANCISCO • SINGAPUR
ST. LOUIS • SIDNEY • TOKIO • TORONTO

INV. N° 19187

Mary
Beatriz



CONCEPTOS DE FISICA MODERNA

www.elsolucionario.org

U.T.N. FACULTAD REGIONAL CBA.
BIBLIOTECA CENTRAL
INGRESO: 27 MAR 2006
PROCEDENCIA: DONACION
INVENTARIO: 5783 1
C.D.: 530
TOP: BEI

CONCEPTOS DE FÍSICA MODERNA
2a. edición

Prohibida la reproducción total o parcial de esta obra,
por cualquier medio, sin autorización escrita del editor.

DERECHOS RESERVADOS © 1977, respecto a la segunda edición en español por
LIBROS McGRAW-HILL DE MÉXICO, S.A. de C.V.
Atlacomulco 499-501, Naucalpan de Juárez, Edo. de México
Miembro de la Cámara Nacional de la Industria Editorial, Reg. Núm. 465

ISBN 968-451-235-X

ISBN 0-07-091528-8
Traducido de la segunda edición en inglés de
CONCEPTS OF MODERN PHYSICS
Copyright © 1973, by McGraw-Hill Book Co., U.S.A.

ISBN 0-07-004363-9

6789012345 8023456791

Impreso en México Printed in Mexico

Esta obra se terminó en octubre de 1981
en Gálvez Impresores, S.A.
Montserrat No. 97
México 21, D.F.

Se tiraron 1 200 ejemplares

CONTENIDO

Prólogo IX
Lista de abreviaturas XI

PARTE I CONCEPTOS BASICOS

Capítulo 1 Relatividad Especial 3
1.1 El experimento de Michelson-Morley 3
1.2 La teoría especial de la Relatividad 10
1.3 La dilatación del tiempo 12
1.4 La paradoja de los gemelos 16
1.5 Contracción de la longitud 17
1.6 La desintegración del mesón 20
*1.7 La transformación de Lorentz 22
*1.8 La transformación inversa de Lorentz 27
*1.9 Suma de velocidades 28
1.10 La relatividad de la masa 30
1.11 Masa y energía 35
1.12 Masa y energía: derivación alternativa 37
Problemas 39

Capítulo 2 Las propiedades corpusculares de las ondas 43
2.1 Efecto fotoeléctrico 44
2.2 La teoría cuántica de la luz 48
2.3 Rayos X 51
2.4 Difracción de rayos X 57
2.5 Efecto Compton 60
2.6 Producción de pares 64
*2.7 Corrimiento gravitacional hacia el rojo 67
Problemas 70

Capítulo 3 Propiedades ondulatorias de las partículas 75
3.1 Ondas de De Broglie 75
3.2 Función de onda 76
3.3 Velocidad de onda de De Broglie 78
3.4 Velocidades de fase y de grupo 81
3.5 La difracción de partículas 84
3.6 El principio de incertidumbre 88
3.7 Aplicaciones del principio de incertidumbre 94
3.8 La dualidad onda-partícula 96
Problemas 99

PARTE 2 EL ATOMO 101

Capítulo 4 Estructura atómica 103
4.1 Modelos atómicos 104
*4.2 Dispersión de partículas alfa 107
*4.3 La fórmula de Rutherford de la dispersión 110
4.4 Dimensiones nucleares 114
4.5 Las órbitas electrónicas 115
4.6 Espectros atómicos 119
4.7 El átomo de Bohr 122
4.8 Niveles de energía y espectros 127
4.9 Movimiento nuclear 131
4.10 Excitación atómica 132
4.11 El principio de correspondencia 135
Problemas 137

Capítulo 5 Mecánica cuántica 141
5.1 Introducción a la mecánica cuántica 142
5.2 La ecuación de onda 142

5.3 La ecuación de Schrödinger: La forma dependiente del tiempo 145
5.4 Valores probables 147
5.5 La ecuación de Schrödinger: La forma en estado estacionario 149
5.6 Partícula en una caja: cuantización de la energía 152
5.7 La partícula en una caja: las funciones de onda 156
5.8 La partícula en una caja no rígida 158
5.9 El oscilador armónico 160
*5.10 El oscilador armónico: la solución de la ecuación de Shcrödinger 165
Problemas 171

Capítulo 6 La teoría cuántica del átomo de hidrógeno 173
6.1 La ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno 175
*6.2 Separación de variables 178
6.3 Los números cuánticos 180
6.4 El número cuántico principal 182
6.5 El número cuántico orbital 182
6.6 El número cuántico magnético 186
6.7 Efecto Zeeman normal 189
6.8 La densidad de probabilidad electrónica 191
6.9 Transiciones radiativas 198
6.10 Las reglas de selección 200
Problemas 202

Capítulo 7 Atomos complejos 205
7.1 El spin del electrón 205
7.2 Acoplamiento órbita-spín 209
7.3 El principio de exclusión 212
7.4 Configuraciones electrónicas 214
7.5 Sistema periódico 216
7.6 La regla de Hund 223
7.7 El momento angular total 224
*7.8 El acoplamiento L S 227
7.9 El acoplamiento jj 230
7.10 Espectros de un electrón 231
*7.11 Espectros de dos electrones 233
7.12 Los espectros de rayos X 234
Problemas 239

PARTE 3 PROPIEDADES DE LA MATERIA 243

Capítulo 8 Física de la molécula
8.1 Formación molecular 245
8.2 Electrones compartidos 247
8.3 El ion molecular H_2^+ 249
8.4 La molécula H_2^+ 254
8.5 Orbitales moleculares 256
8.6 Orbitales híbridos 263
8.7 Enlaces carbono-carbono 267
8.8 Niveles de energía de rotación 271
8.9 Niveles de energía de vibración 274
8.10 Espectros electrónicos moleculares 283
Problemas 286

Capítulo 9 Mecánica estadística 289
9.1 Leyes de distribución estadística 289
9.2 Espacio-fase 290
*9.3 Distribución de Maxwell-Boltzman 291
*9.4 Evaluación de constantes 295
9.5 Energías moleculares en un gas ideal 297
9.6 Espectros de rotación 300
*9.7 Distribución de Bose-Einstein 303
9.8 Radiación de cuerpo negro 306
*9.9 Distribución de Fermi-Dirac 310
9.10 Comparación de resultados 312
9.11 El Láser 313
Problemas 316

Capítulo 10 El estado sólido 319
10.1 Sólidos cristalinos y amorfos 319
10.2 Cristales iónicos 321
10.3 Cristales covalentes 328
10.4 Fuerzas de Van Der Walls 329
10.5 El enlace metálico 333
10.6 La teoría de bandas de los sólidos 336
10.7 Energía de Fermi 341
10.8 Distribución de energías electrónicas 344
10.9 Zonas de Brillouin 346
10.10 El origen de las bandas prohibidas 350
10.11 La masa efectiva 357
Problemas 358

PARTE 4 EL NUCLEO 363

Capítulo 11 El núcleo atómico 365
11.1 Masas atómicas 365
11.2 El neutrón 368
11.3 Los núcleos estables 370
11.4 Los tamaños y las formas nucleares 373
11.5 La energía de enlace 375
*11.6 El deuterón 377
*11.7 Estado fundamental del deuterón 381
11.8 Los estados de triplete y de singulete 383
11.9 El modelo de la gota líquida 384
11.10 El modelo de capas 387
Problemas 390

Capítulo 12 Transformaciones nucleares 393
12.1 Desintegración radiactiva 393
12:2 Series radioactivas 397
12.3 La desintegración alfa 400
*12.4 Penetración de barrera 403
*12.5 Teoría de la desintegración alfa 408
12.6 La desintegración beta 412
12.7 Desintegración beta inversa 415
12.8 Desintegración gama 416
12.9 Sección transversal 417
12.10 El núcleo compuesto 421
12.11 La fisión nuclear 424
12.12 Los elementos transuránicos 427
12.13 La energía termonuclear 427
Problemas 431

Capítulo 13 Las partículas elementales 435
13.1 Las antipartículas 435
13.2 Teoría del mesón de las fuerzas nucleares 437
13.3 Piones y muones 440
13.4 Kaones e hiperones 442
13.5 Sistemática de las partículas elementales 443
13.6 El número de extrañeza 447
13.7 Spín isotópico 450
13.8 Simetrías y principios de conservación 451
13.9 Teorías de partículas elementales 455
Problemas 457

Soluciones a problemas impares 459

Indice 463

PROLOGO

Este libro incluye el material de un semestre para el curso de física moderna. Para poder estudiarlo, los alumnos deben tener conocimientos de física clásica y cálculo elemental. Primero, se exponen la teoría relativista y la cuántica para proporcionar un marco de referencia que permita al lector comprender la Física del Atomo y del Núcleo. A continuación se desarrolla la teoría atómica, y se hace énfasis en las nociones de mecánica cuántica, seguida de una exposición de las propiedades de los agregados de átomos. Por último, se estudian los núcleos atómicos y las partículas elementales.

El texto da más importancia, intencionalmente, a las ideas que a los métodos experimentales y aplicaciones prácticas, porque se consideró que en los niveles elementales se aprovecha mejor un marco conceptual que un cúmulo de detalles aislados. Sin embargo, se hace notar que todas las teorías físicas dependen de su experimentación lo que a fin de cuentas determinará su vida o su muerte, y se incluyen un gran número de amplias explicaciones a fin de demostrar con exactitud la forma como un concepto abstracto se puede relacionar con observaciones reales mensurables. Muchos maestros preferirán que sus estudiantes no hagan exposiciones más complejas (aun cuando no sean difíciles en el aspecto matemático); por eso, se indican con asteriscos las secciones que se pueden estudiar en forma más superficial, sin que por ello se pierda la continuidad; también se han marcado con asterisco los problemas que están basados en el contenido de dicha sección. Por supuesto, también es posible hacer omisiones. La relatividad, por ejemplo, se puede estudiar antes de como aquí se ha dispuesto, y la Parte 3, se puede omitir totalmente si se va a exponer en trabajos posteriores. De esta manera, este libro ofrece la posibilidad de que el maestro programe el tipo de curso que crea más conveniente: ya sea una semblanza general o un estudio más profundo de los temas seleccionados, o que se elija el tratamiento más apropiado para sus alumnos.

www.elsolucionario.org

Mi libro *Perspectives of Modern Physics*, que es un texto de la División Superior de esta serie, ofrece una versión ampliada de este volumen, que no requiere un grado más alto de preparación matemática; otros textos de la División Superior exponen en detalle los aspectos específicos de la Física Moderna.

En esta segunda edición se ha reorganizado y reescrito gran parte del texto original y se amplió la exposición de varios temas, se eliminaron asimismo, algunos materiales de interés circunstancial. Agradezco a Y. Beers y T, Satoh las valiosas sugerencias que hicieron a este respecto.

Arthur Beiser

LISTA DE ABREVIATURAS

Å	Angstrom
amp	Ampere
atm	atmósfera
b	barn
C	Coulomb
Ci	Curie
d	día
eV	electrón-volt
F	Farad
fm	fermi
g	gramo
h	hora
Hz	Hertz
J	joule
K	grado Kelvin
m	metro
mi	milla
min	minuto
mol	mol
N	Newton
s	segundo
T	tesla
u	unidades atómicas de masa
V	volt
W	watt
yr	año

CONCEPTOS BASICOS 1

RELATIVIDAD ESPECIAL 1

Nuestro estudio de la física moderna empieza con una consideración sobre la teoría especial de la relatividad. Este es un punto de partida lógico, ya que toda la física tiene íntima relación con las mediciones, y la relatividad implica un análisis de cómo éstas dependen del observador, de igual manera que de lo observado. De la relatividad surge una nueva mecánica en la que existen estrechas relaciones entre espacio y tiempo, masa y energía. Sin estas relaciones sería imposible comprender el mundo microscópico dentro del átomo, cuyo esclarecimiento constituye el problema central de la física moderna.

1.1 EL EXPERIMENTO DE MICHELSON-MORLEY

La teoría ondulatoria de la luz se estableció y perfeccionó varias décadas antes de que se conociera la naturaleza electromagnética de las ondas. A los pioneros de la óptica les pareció razonable considerar a las ondas luminosas como ondulaciones en un medio elástico llamado *éter*, que ocupaba todo el espacio, y el éxito de la explicación de los fenómenos de difracción e interferencia con base en ondas de este medio hizo que su noción resultara tan común, que se aceptó su existencia sin discusión. El desarrollo que realizó Maxwell sobre la teoría electromagnética de la luz en 1864, y su verificación experimental por Hertz en 1887, privaron al éter de la mayoría de sus propiedades, pero nadie de aquella época se mostró deseoso de rechazar la idea fundamental que el éter representaba: que la luz se propaga con relación a algún tipo de sistema universal de referencia. Consideremos una analogía simple para observar lo que esta idea implica.

La Fig. 1-1 es el esquema de un río de anchura D que fluye con velocidad v. Dos botes parten de una orilla del río con la misma velocidad V. El bote A

www.elsolucionario.org

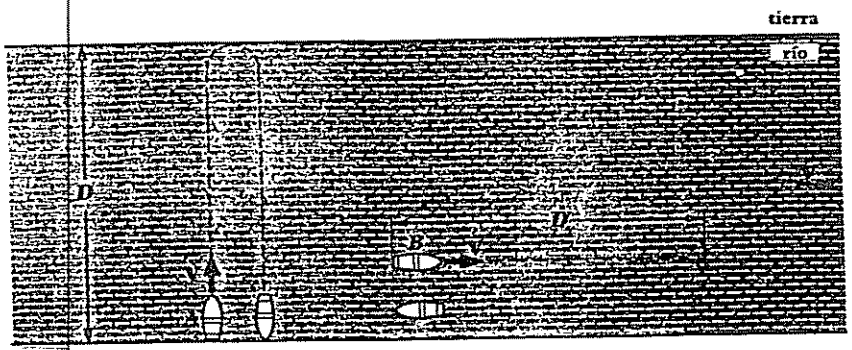


FIGURA 1-1 El bote A atraviesa en línea recta el río y regresa a su punto de partida, mientras que el bote B se desplaza río abajo una distancia igual y luego regresa.

cruza el río hasta llegar a un punto en la otra orilla, exactamente opuesto al de partida, y después regresa; mientras que el bote B recorre aguas abajo la distancia D y posteriormente regresa al punto de partida. Calculemos el tiempo empleado en cada recorrido completo.

Consideremos en primer lugar al bote A. Si A avanza perpendicularmente al río, la corriente lo arrastrará aguas abajo, alejándolo de su meta en la orilla contraria (Fig. 1-2). Para compensar la acción de la corriente deberá orientarse

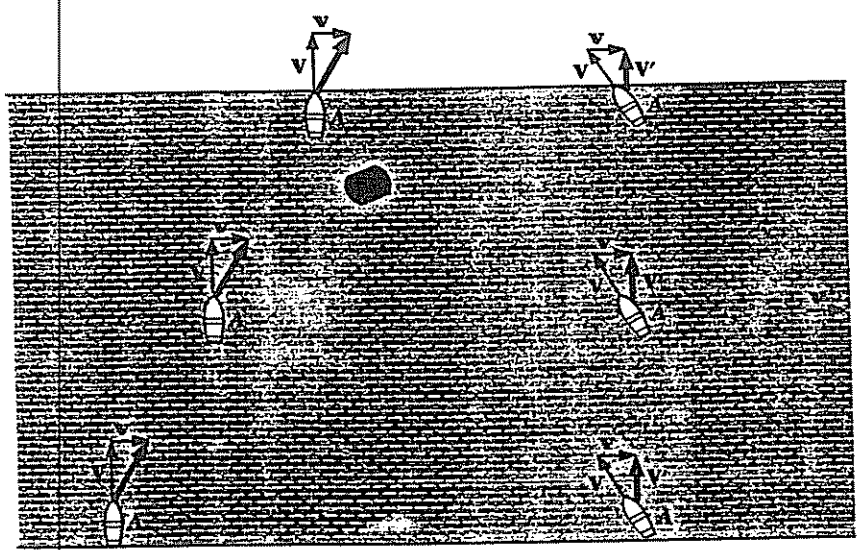


FIGURA 1-2 El bote A debe dirigir la proa aguas arriba para compensar la corriente del río.

ligeramente aguas arriba. Para conseguir esto, la componente de su velocidad en dirección aguas arriba deberá ser exactamente $-v$ para neutralizar la corriente del río v, quedando la componente V' como la velocidad neta perpendicular al río. En la Fig. 1-2 se observa que estas velocidades están relacionadas por la siguiente fórmula:

$$V^2 = V'^2 + v^2$$

de manera que la velocidad real con la que el bote A cruza el río es

$$\begin{aligned} V' &= \sqrt{V^2 - v^2} \\ &= V\sqrt{1 - v^2/V^2} \end{aligned}$$

Por tanto, el tiempo necesario para la travesía de ida es igual a la distancia D dividida entre la velocidad V'. Como el tiempo de regreso es el mismo, el tiempo de recorrido completo t_A es dos veces D/V', o sea

$$t_A = \frac{2D/V}{\sqrt{1 - v^2/V^2}} \tag{1.1}$$

El caso del bote B es diferente. Cuando navega aguas abajo, su velocidad relativa a la orilla es igual a la suma de su propia velocidad V *más* la velocidad v del río (Fig. 1-3), y recorre la distancia D aguas abajo en el tiempo $D/(V + v)$. Sin embargo, en el viaje de regreso, la velocidad de B relativa a la orilla es igual a su propia velocidad V *menos* la velocidad v del río. Por tanto, se requiere un tiempo mayor $D/(V - v)$ para recorrer aguas arriba la distancia D hasta el punto de partida. El tiempo total de su recorrido completo t_B es igual a la suma de estos dos tiempos, es decir,

$$t_B = \frac{D}{V + v} + \frac{D}{V - v}$$

Utilizando en ambos términos el común denominador $(V + v)(V - v)$,

$$\begin{aligned} t_B &= \frac{D(V - v) + D(V + v)}{(V + v)(V - v)} \\ &= \frac{2DV}{V^2 - v^2} \\ &= \frac{2D/V}{1 - v^2/V^2} \end{aligned} \tag{1.2}$$

que es mayor que t_A, el tiempo de recorrido total del otro bote.

La razón entre los tiempos t_A y t_B es

$$\frac{t_A}{t_B} = \sqrt{1 - v^2/V^2} \tag{1.3}$$

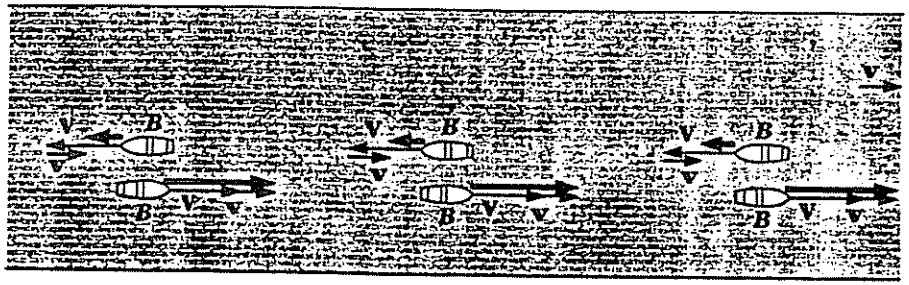


FIGURA 1-3 La velocidad del río aumenta la velocidad relativa del bote B con respecto a la orilla cuando navega aguas abajo y la disminuye en la misma proporción cuando navega aguas arriba.

Si conocemos la velocidad común V de ambos botes y medimos la razón t_A/t_B, podremos determinar la velocidad v del río.

El razonamiento utilizado en este problema se puede transferir al problema análogo del paso de ondas luminosas a través del éter. Si el espacio está lleno de éter, nos movemos a través de él a una velocidad por lo menos igual a la de la rotación de la Tierra en su órbita alrededor del Sol, que es de 3×10^4 m/s (18.5 millas/s); y si el Sol está en movimiento, nuestra velocidad a través del éter es todavía mayor (Fig. 1-4). Desde el punto de vista de un observador que

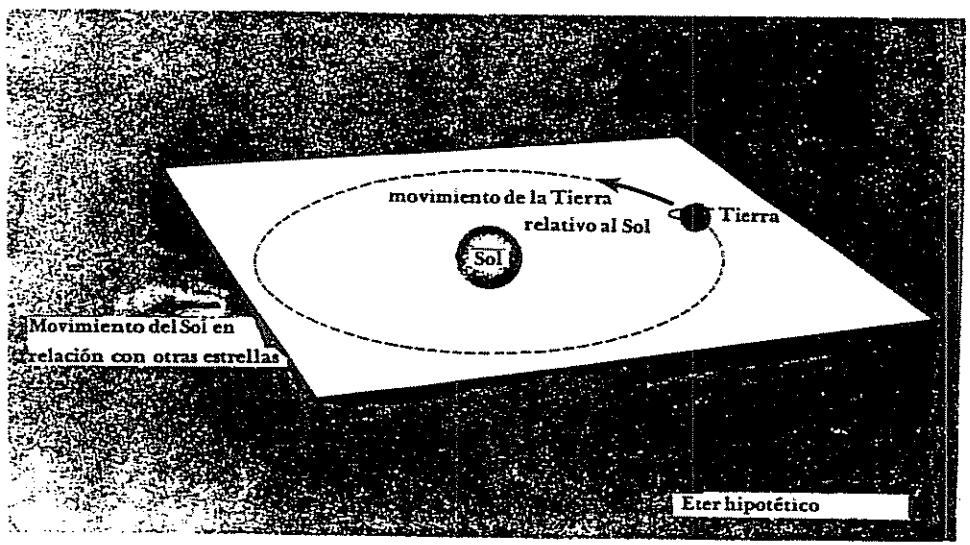


FIGURA 1-4 Movimientos de la Tierra a través de un éter hipotético.

está colocado en la Tierra, el éter se mueve con respecto a ésta. Para detectar este movimiento, podemos utilizar un par de rayos luminosos formados por un espejo semiplateado en lugar de un par de botes (Fig. 1-5). Uno de estos rayos luminosos se dirige hacia un espejo en una trayectoria perpendicular a la corriente del éter, mientras que el otro rayo se dirige a otro espejo, siguiendo una trayectoria paralela a la misma corriente. El sistema óptico se dispone de manera que ambos rayos regresen a la misma pantalla de observación. La placa de vidrio transparente tiene por objeto conseguir que ambos rayos atraviesen los mismos espesores de aire y vidrio.

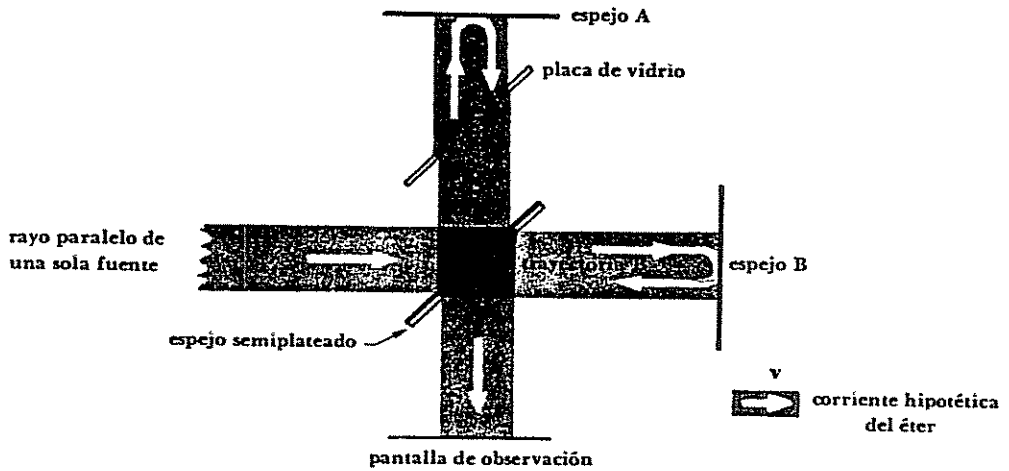


FIGURA 1-5 Experimento de Michelson-Morley.

Si las longitudes de las trayectorias de ambos rayos son *exactamente* iguales, llegarán a la pantalla en fase e interferirán positivamente, provocando un campo brillante. Sin embargo, la presencia de una corriente de éter en la dirección indicada haría que los tiempos empleados por los dos rayos en ir desde el espejo semiplateado hasta la pantalla fueran diferentes, de manera que ya no llegarían en fase, sino que interferirían negativamente. Este es, en esencia, el famoso experimento que llevaron a cabo en 1887 los físicos norteamericanos Michelson y Morley.

En las condiciones reales del experimento, los dos espejos no se colocan perfectamente perpendiculares, por lo que en la pantalla aparecen franjas de interferencia brillantes y obscuras debidas a las diferencias de recorrido entre ondas luminosas adyacentes (Fig. 1-6). Si se varía la longitud de algunas de las trayectorias ópticas del aparato, las franjas se mueven a través de la pantalla a medida que en cada punto las ondas se refuerzan y se anulan sucesivamente.

FIGURA 1-6 Franjas observadas en el experimento de Michelson-Morley.

Por ello, el aparato estacionario no nos puede indicar nada referente a las diferencias de tiempo entre las dos trayectorias. Sin embargo, cuando se gira 90° el aparato, las dos trayectorias cambian su orientación con respecto a la hipotética corriente de éter, de manera que el rayo que necesitaba un tiempo t_A para el recorrido total requiere ahora un tiempo t_B, y viceversa. Si estos tiempos son diferentes, las franjas se moverán a través de la pantalla durante el giro.

Calculemos el desplazamiento de las franjas según la teoría del éter. En las ecuaciones 1.1 y 1.2, la diferencia de tiempo entre las dos trayectorias debido al arrastre del éter es

$$\begin{aligned}\Delta t &= t_B - t_A \\ &= \frac{2D/V}{1 - v^2/V^2} - \frac{2D/V}{\sqrt{1 - v^2/V^2}}\end{aligned}$$

donde v es la velocidad del éter que consideraremos como la velocidad de rotación de la Tierra, es decir, 3×10^4 m/s, y V es la velocidad de la luz c, donde $c = 3 \times 10^8$ m/s. Por tanto,

$$\begin{aligned}\frac{v^2}{V^2} &= \frac{v^2}{c^2} \\ &= 10^{-8}\end{aligned}$$

que es mucho menor que 1. De acuerdo con el teorema del binomio, cuando x es mucho menor que 1,

$$(1 \pm x)^n \approx 1 \pm nx$$

Podemos, por tanto, expresar Δt con suficiente aproximación como

$$\begin{aligned}\Delta t &= \frac{2D}{c}\left[\left(1 + \frac{v^2}{c^2}\right) - \left(1 + \frac{1}{2}\frac{v^2}{c^2}\right)\right] \\ &= \left(\frac{D}{c}\right)\left(\frac{v^2}{c^2}\right)\end{aligned}$$

donde D es la distancia entre el espejo semiplateado y cada uno de los otros espejos. La diferencia de trayectoria d, que corresponde a una diferencia de tiempo Δt es

$$d = c\,\Delta t$$

Si d corresponde al desplazamiento de n franjas

$$d = n\lambda$$

siendo λ la longitud de onda de la luz utilizada. Igualando estos dos valores de d, encontramos que

$$\begin{aligned}n &= \frac{c\,\Delta t}{\lambda} \\ &= \frac{Dv^2}{\lambda c^2}\end{aligned}$$

En el experimento real, Michelson y Morley lograron para D una longitud efectiva de 10 m, aproximadamente, mediante el empleo de reflexiones múltiples, y la longitud de onda de la luz que utilizaron fue de aproximadamente 5,000 Å (1 Å $= 10^{-10}$ m). El desplazamiento esperado para cada trayectoria cuando se hace girar el aparato 90° es, por tanto,

$$\begin{aligned}n &= \frac{Dv^2}{\lambda c^2} \\ &= \frac{10\text{ m} \times (3 \times 10^4\text{ m/s})^2}{5 \times 10^{-7}\text{ m} \times (3 \times 10^8\text{ m/s})^2} \\ &= 0.2\text{ franjas}\end{aligned}$$

Como el desplazamiento de franjas se verifica en ambos recorridos, el desplazamiento total debería ser de $2n$, o sea, 0.4 franjas. Un desplazamiento de esta magnitud se observa fácilmente, por lo que Michelson y Morley esperaban demostrar directamente la existencia del éter.

Ante la sorpresa general, no se detectó desplazamiento alguno de las franjas. El experimento se realizó en distintas estaciones del año y en diferentes lugares; se llevaron a cabo experimentos de otro tipo con el mismo objeto, pero las conclusiones fueron siempre idénticas: no se detectó movimiento del éter.

El resultado negativo del experimento de Michelson-Morley tuvo dos consecuencias. En primer lugar, al demostrar que el éter carecía de propiedades mensurables, resultaba insostenible la hipótesis del éter —final ignominioso para lo que había sido una idea respetada. En segundo lugar, se sugería un nuevo principio físico: la velocidad de la luz en el espacio libre es la misma en todas partes, independientemente de cualquier movimiento de la fuente o del observador.

www.elsolucionario.org

1.2 LA TEORIA ESPECIAL DE LA RELATIVIDAD

Hemos mencionado anteriormente el papel del éter como sistema universal de referencia con respecto al cual se suponía que se propagaban las ondas luminosas. Siempre que hablamos de "movimiento" nos referimos, por supuesto, a "movimiento con respecto a un sistema de referencia". El sistema de referencia puede ser una carretera, la superficie de la Tierra, el Sol, el centro de nuestra galaxia; pero en cada caso debemos especificarlo. Si se dejan caer piedras en las Bermudas y en Perth (Australia), en ambos casos caerán "hacia abajo" y sin embargo, se moverán en sentidos exactamente opuestos con respecto al centro de la Tierra. ¿Cuál sería en este caso el sistema de referencia correcto, la superficie o el centro de la Tierra?

La respuesta es que *todos* los sistemas de referencia son igualmente correctos si bien alguno de ellos puede ser más conveniente en un caso particular. *Si* todo el espacio estuviera lleno de éter, podríamos referir a éste todos los movimientos. La ausencia de éter implica, por tanto, que no hay un sistema universal de referencia, puesto que la luz (o en general, las ondas electromagnéticas) es el único medio por el que se puede trasmitir información a través del espacio vacío. Todo movimiento existe con relación a la persona o al instrumento que lo observa. Si nos encontramos en un globo libre sobre un banco uniforme de nubes y vemos que otro globo libre cambia de posición con respecto a nosotros, no podemos saber cuál de los globos es el que "realmente" se mueve. Si estuviéramos aislados en el universo, no podríamos saber si estábamos en movimiento o no, porque sin un sistema de referencia el concepto de movimiento no tiene significado.

La teoría de la relatividad surgió del análisis de las consecuencias físicas que implicaba la ausencia de un sistema universal de referencia. La teoría de la relatividad especial que desarrolló Albert Einstein en 1905, trata problemas con relación a *sistemas inerciales de referencia,* que son sistemas de referencia que se mueven a velocidad constante con respecto a otros. La teoría general de la relatividad, propuesta por Einstein una década más tarde, trata problemas con relación a sistemas de referencia acelerados con respecto a otros. Un observador en un laboratorio aislado *puede* detectar aceleraciones. Cualquiera que haya estado en un elevador o en un carrusel puede verificarlo por sí mismo. La teoría especial ha ejercido una profunda influencia sobre toda la física; por este motivo, hacemos una breve referencia a la teoría general.

La teoría de la relatividad especial se basa en dos postulados. El primero establece que las leyes físicas se pueden expresar mediante ecuaciones que tienen la misma forma en todos los sistemas de referencia que se mueven a velocidad constante unos con respecto a otros. Este postulado expresa la ausencia de un sistema universal de referencia. Si las leyes de la física fueran diferentes para observadores distintos en movimiento relativo, se podría determinar, partiendo de estas diferencias, qué objetos están "estacionarios" en el espacio y cuáles están en "movimiento". Pero como no hay un sistema universal de referencia, esta distinción no existe en la naturaleza; de ahí el postulado anterior.

El segundo postulado de la teoría especial establece que **la velocidad de la luz en el espacio libre tiene el mismo valor para todos los observadores, independientemente de su estado de movimiento.** Este postulado es consecuencia directa de los resultados del experimento de Michelson-Morley y de otros muchos.

A primera vista, estos postulados no parecen muy radicales. Pero en realidad, alteran casi todos los conceptos intuitivos de tiempo y espacio que nos hemos formado basándonos en la experiencia cotidiana. Ilustraremos esta afirmación con un ejemplo sencillo. En la Fig. 1-7 tenemos de nuevo los dos botes *A* y *B;* el bote *A* está en reposo en el agua mientras que el bote *B* navega a velocidad constante v. Por existir una niebla densa, un observador en cualesquiera de los botes no puede saber cuál de los botes es el que está en movimiento. En el momento en que *B* llega junto a *A* se dispara una luz de bengala. Esta luz se propaga uniformemente en todas las direcciones, de acuerdo con el segundo postulado de la relatividad especial. Un observador en cualquiera de los dos botes verá difundirse una esfera de luz cuyo centro será *él mismo,* de acuerdo con el primer postulado de la relatividad especial, aun cuando uno de ellos esté cambiando de posición con respecto al punto de disparo de la luz de

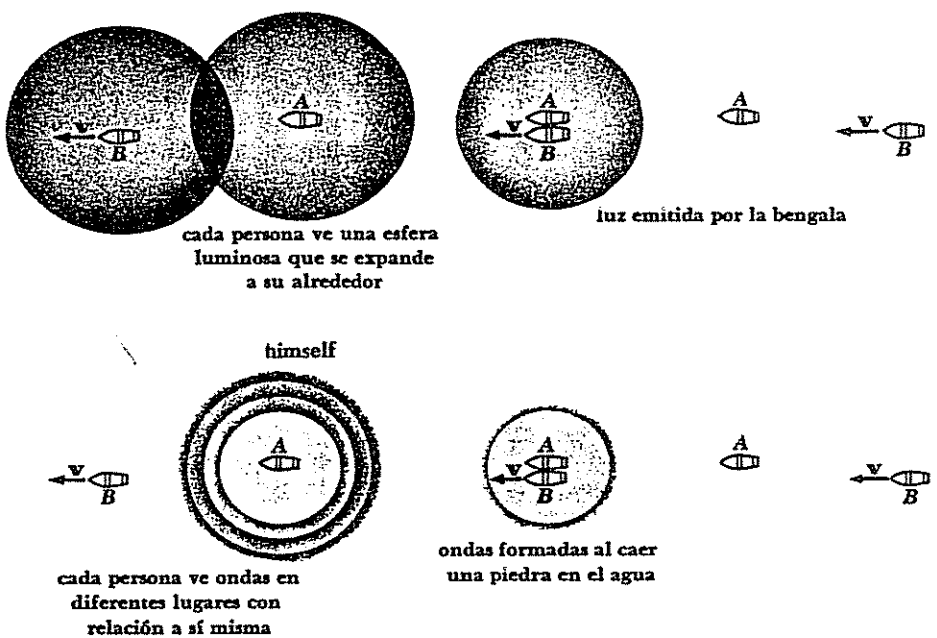


FIGURA 1-7 Los fenómenos relativistas difieren de la experiencia cotidiana.

bengala. Los observadores no pueden saber cuál es el que está experimentando el cambio de posición, ya que la niebla elimina cualquier sistema de referencia que no sea el propio bote, y como la velocidad de la luz es la misma para ambos, los dos deben ver el mismo fenómeno.

¿Por qué es anormal la situación de la Fig. 1-7? Consideremos otro ejemplo más común. Los botes están en el mar en un día claro, y alguien, desde uno de ellos, deja caer una piedra al mar cuando los botes están juntos. Se forma un conjunto de ondas circulares, como se muestra en la parte inferior de la Fig. 1-7, que los observadores de cada bote *ven en forma diferente.* Observando si está o no en el centro del conjunto de ondas, cada observador podrá determinar si se está moviendo o no con respecto al agua. El agua es en sí un sistema de referencia y un observador, sobre un bote en movimiento mide las velocidades con respecto a sí mismo, que son diferentes en distintas direcciones, al contrario de la velocidad de onda uniforme que mide un observador desde un bote estacionario. Es importante observar que movimiento y ondas *en el agua* son completamente diferentes de movimiento y ondas *en el espacio;* el agua es por sí misma un sistema de referencia, mientras que el espacio no lo es, y las velocidades de las ondas en el agua varían con el movimiento del observador, mientras que las velocidades de las ondas de la luz en el espacio no varían.

La única manera de interpretar el hecho de que los observadores de los dos botes de nuestro ejemplo perciban idénticas esferas de luz en expansión es considerar al sistema de coordenadas de cada observador, bajo el punto de vista del otro, como si se vieran afectados por su movimiento relativo. Si desarrollamos esta idea, utilizando únicamente leyes físicas admitidas y los postulados de Einstein, veremos que se pueden predecir muchos efectos peculiares. Precisamente, uno de los mayores logros de la física moderna es la confirmación experimental de cada uno de estos efectos.

1.3 LA DILATACION DEL TIEMPO

En primer lugar, utilizaremos los postulados de la relatividad especial para investigar cómo el movimiento relativo altera las mediciones de longitudes e intervalos de tiempo.

Un reloj en movimiento con respecto a un observador parece tener un tic tac menos rápido que si está en reposo con relación al observador. Es decir, si alguien en una nave espacial encuentra que el intervalo de tiempo entre dos eventos en la nave espacial es t_0, nosotros, desde la Tierra, observaríamos que el mismo intervalo tendría una duración mayor t. La cantidad t_0, que se determina mediante eventos que ocurren *en el mismo lugar,* en el marco de referencia de un observador, recibe el nombre de *tiempo propio* del intervalo entre los eventos. Cuando se presencian desde la Tierra los eventos que marcan el principio y el final del intervalo de tiempo ocurren en lugares diferentes y,

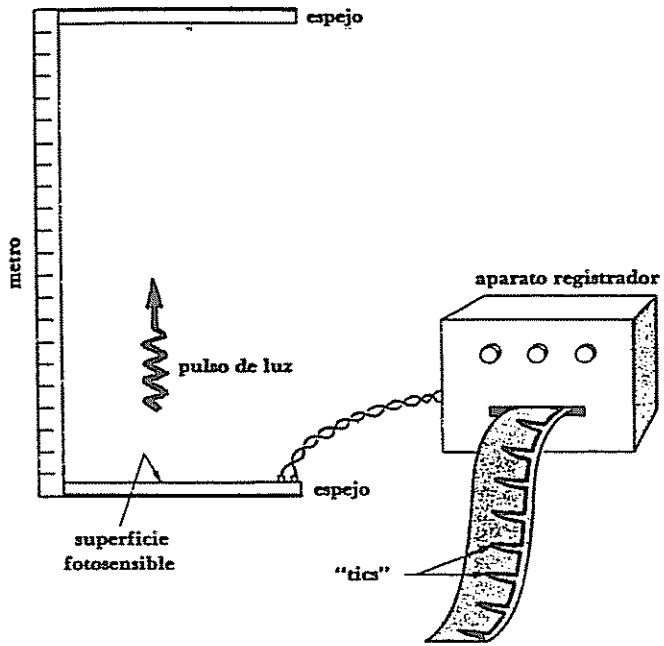


FIGURA 1-8 Un reloj sencillo. Cada "tic" corresponde a un recorrido completo del pulso de luz desde el espejo inferior hasta el superior y regreso.

por tanto, la duración del intervalo parece mayor que el tiempo propio. Este efecto recibe el nombre de *dilatación del tiempo.*

Para ver cómo se presenta la dilatación del tiempo, examinemos el funcionamiento del reloj particularmente sencillo que se muestra en la Fig. 1-8 y observemos cómo nuestras mediciones se alteran por el movimiento relativo. Este reloj consta de una barra de longitud L_0 con un espejo en cada extremo. Entre los dos espejos se refleja, de un lado a otro, un pulso luminoso y a uno de ellos se une un dispositivo apropiado para dar un "tic" cada vez que el pulso de luz choque con él. (Este dispositivo puede ser una superficie fotosensible colocada sobre el espejo y adaptada para emitir una señal eléctrica cada vez que llegue el pulso de luz.) El tiempo propio t_0 entre tics es

$$t_0 = \frac{2L_0}{c} \tag{1.4}$$

Si la barra mide 1 m de largo,

$$t_0 = \frac{2\text{ m}}{3 \times 10^8\text{ m/s}} = 0.67 \times 10^{-8}\text{ s}$$

y habrá $1\,5 \times 10^8$ tics/s. Se construyen dos relojes de este tipo, idénticos, y uno de ellos se monta en la nave espacial en forma perpendicular a la dirección del movimiento, mientras que el otro permanece en reposo sobre la superficie de la Tierra.

Ahora preguntamos: ¿cuánto tiempo t transcurre entre tics en el reloj en movimiento, de acuerdo con la medición de un observador desde la Tierra con un reloj idéntico que está en reposo con respecto a él? Cada tic implica el recorrido de ida y vuelta de un pulso de luz a velocidad c entre el espejo inferior y el superior. Durante el recorrido, el reloj de la nave espacial está en movimiento, lo que significa que el pulso de luz, según se ve desde la Tierra, sigue realmente una trayectoria en zig zag. (Fig. 1-9). Desde el espejo inferior hasta el superior, en el tiempo $t/2$, el pulso de luz recorre una distancia horizontal de $vt/2$ y una distancia total de $ct/2$. Como L_0 es la distancia vertical entre los espejos

$$\left(\frac{ct}{2}\right)^2 = L_0^2 + \left(\frac{vt}{2}\right)^2$$

$$\frac{t^2}{4}(c^2 - v^2) = L_0^2$$

$$t^2 = \frac{4L_0^2}{c^2 - v^2} = \frac{(2L_0)^2}{c^2(1 - v^2/c^2)}$$

y

$$t = \frac{2L_0/c}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \qquad (1.5)$$

Pero $2L_0/c$ es el intervalo de tiempo t_0 entre tics en el reloj que está en la Tierra, como se ve en la Ec. 1.4, por tanto

$$t = \frac{t_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \qquad (1.6)$$

Dilatación del tiempo

El tic del reloj en movimiento en la nave espacial parece tener un ritmo más lento que el del reloj que está en reposo sobre la Tierra, según lo ve un observador sobre la Tierra.

Se sigue exactamente el mismo análisis para el caso de las mediciones del reloj de la Tierra llevadas a cabo por el piloto de la nave espacial. Para éste, el pulso de luz del reloj en la Tierra sigue una trayectoria en zig zag que requiere un tiempo total por recorrido completo t, mientras que su propio reloj, en reposo, en la nave espacial da un tic a intervalos de t_0. También él encuentra que

$$t = \frac{t_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

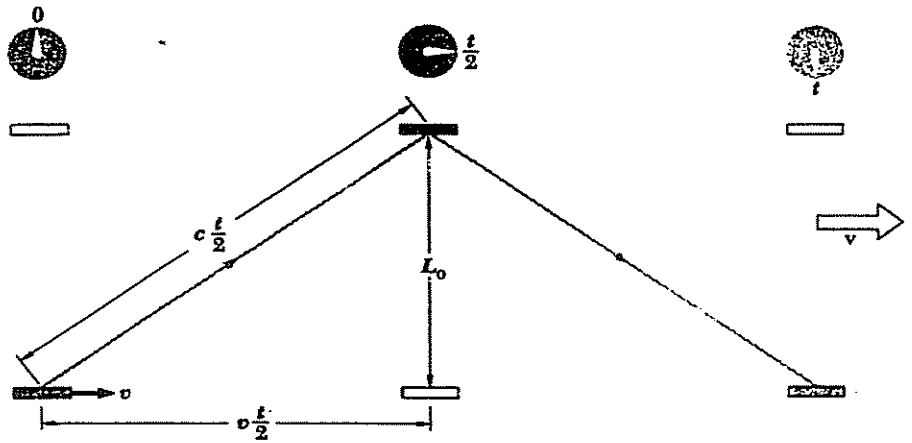


FIGURA 1-9 Reloj luminoso en una nave espacial según lo ve un observador en reposo sobre la Tierra. Los espejos son paralelos a la dirección del movimiento de la nave espacial.

por tanto, el efecto es recíproco: *cada* observador encuentra que los relojes en movimiento relativo a él dan el tic más lentamente que cuando están en reposo.

Nuestro estudio se ha basado en un reloj un tanto excepcional que utiliza un pulso de luz que rebota arriba y abajo entre dos espejos. ¿Se podrán aplicar las mismas conclusiones a relojes más comunes que utilizan una determinada maquinaria para producir tics a intervalos de tiempo constantes? La respuesta debe ser sí, ya que si un reloj de espejos y un reloj común en la nave espacial concordaran con otros en la Tierra, pero no en vuelo, la discrepancia entre ellos podría utilizarse para determinar la velocidad de la nave espacial sin referirla a cualquier otro objeto —lo que contradice el principio de que todo movimiento es relativo. Confirman esta respuesta cálculos detallados sobre lo que ocurre a relojes comunes en movimiento, vistos desde la Tierra. Por ejemplo, como estudiaremos en la Sec. 1.10, la masa de un objeto es mayor cuando está en movimiento, de manera que el periodo de un objeto oscilatorio debe ser mayor en la nave espacial en movimiento. Por tanto, *todos* los relojes en reposo relativo mutuo se comportan de la misma manera para todos los observadores, independientemente de cualquier movimiento a velocidad constante, tanto del grupo de relojes como del de observadores.

El carácter relativo del tiempo tiene varias implicaciones. Por ejemplo, eventos que para un observador parecen ocurrir simultáneamente pueden no ser simultáneos para otro en movimiento relativo, y viceversa. ¿Quién tiene razón? La pregunta, por supuesto, carece de sentido: *ambos* observadores tienen "razón", ya que cada uno de ellos sencillamente mide lo que ve.

www.elsolucionario.org

Como la simultaneidad es una noción relativa, no absoluta, se deben descartar teorías físicas que requieran de eventos simultáneos en diferentes lugares. El principio de conservación de la energía en su forma elemental establece que el contenido en energía total del universo es constante, pero no descarta un proceso en el que una cierta cantidad de energía ΔE desaparece en un punto al mismo tiempo que una cantidad igual de energía ΔE surge espontáneamente en otro lugar sin que haya transporte real de energía del primer lugar al otro. Debido a que la simultaneidad es relativa, algunos observadores del proceso encontrarán que la energía no se ha conservado. Para rescatar la conservación de la energía e incorporarla a la teoría especial de la relatividad, es necesario, por tanto, decir que, cuando desaparece energía de algún sitio y aparece en otro, en realidad ha *fluido* desde el primer lugar hasta el segundo. (Por supuesto, un flujo de energía puede ocurrir de diferentes maneras.) Por tanto, la energía se conserva *localmente* en cualquier región arbitraria del espacio y en cualquier tiempo, no simplemente cuando se considera al universo como un todo —lo cual es un enunciado mucho más poderoso de este principio.

Aunque el tiempo es una cantidad relativa, no todas las nociones de tiempo que surgen de la experiencia cotidiana son incorrectas. El tiempo no corre hacia atrás para *ningún* observador, por ejemplo: una secuencia de eventos que ocurren en cierto lugar a t_1, t_2, t_3, . . . transcurrirá en el mismo orden para todos los observadores de todas partes, aunque no necesariamente con los mismos intervalos de tiempo $t_2 - t_1$, $t_3 - t_2$, . . . entre cada par de eventos. De manera similar, ningún observador distante, independientemente de su estado de movimiento, puede ver un evento antes de que éste tenga lugar o, en forma más precisa, antes de que lo vea un observador próximo —ya que la velocidad de la luz es finita y las señales requieren el periodo mínimo L/c para recorrer una distancia L. No hay manera de escudriñar el futuro, aun cuando perspectivas temporales (y, como veremos, espaciales) de eventos pasados puedan parecer diferentes a distintos observadores.

1.4 LA PARADOJA DE LOS GEMELOS

Ahora ya podemos comprender el famoso fenómeno relativista conocido como la paradoja de los gemelos. Esta paradoja implica dos relojes idénticos, uno de los cuales permanece en la Tierra, mientras el otro se envía al espacio con una velocidad v y regresa después en el tiempo t. Es común sustituir a los relojes reales por un par de varones gemelos idénticos, denominados A y B; esta sustitución es perfectamente aceptable, ya que el proceso de la vida —latidos cardiacos, respiración, etc.— constituye un reloj biológico de razonable regularidad.

El gemelo A sale, a los 20 años de edad, y viaja a una velocidad de $0.99c$. A su hermano B, sobre la Tierra, le parece que A está viviendo más lentamente, de hecho, a un ritmo de sólo

$$\sqrt{1 - v^2/c^2} = \sqrt{1 - (0.99c)^2/c^2} = 0.14 = 14 \text{ por ciento}$$

comparado con B. Por cada inspiración que efectúa A, B efectúa 7; por cada comida que realiza A, B ingiere 7; por cada pensamiento de A, B piensa 7. Finalmente, al cabo de 70 años registrados por B, A regresa a casa, de 30 años, mientras que B tiene 90 años.

¿Dónde está la paradoja? Si examinamos la situación desde el punto de vista del gemelo A en la nave espacial, B sobre la Tierra se mueve a $0.99\ c$. Por tanto, podemos esperar que B haya envejecido 30 años al regreso de la nave espacial, mientras que A tendrá 90 años en ese momento —justamente lo contrario de lo que se concluyó en el párrafo anterior.

La resolución de la paradoja depende del hecho de que la nave espacial se acelere en varias etapas de su viaje: cuando sale, cuando da la vuelta y, finalmente, cuando se detiene. Durante cada una de estas aceleraciones, A no estaba en un sistema inercial de referencia y los sistemas inerciales correspondientes a los viajes de ida y de regreso eran diferentes. El gemelo que se quedó en la Tierra, B, por otra parte, no fue acelerado y permaneció todo el tiempo en el mismo sistema inercial. Las mediciones de B pueden, por tanto, interpretarse sobre la base de la relatividad especial, y la conclusión de que A es más joven cuando regresa, es correcta. Por supuesto, para el *propio* A su periodo de vida no se ha prolongado, ya que por muy largos que a su hermano B le hayan parecido los 10 años que pasó en la nave, han sido únicamente 10 años en lo que a él respecta. Lo que ocurrió fue que las aceleraciones de A alteraron sus procesos biológicos y, aplicando las conclusiones de la relatividad general en el caso de relojes acelerados, encontramos que a su regreso A es más joven que B en la cantidad exacta esperada con base en los análisis de B que utiliza la fórmula de la dilatación del tiempo.

1.5 CONTRACCION DE LA LONGITUD

Las mediciones de longitudes así como las de intervalos de tiempo se alteran por el movimiento relativo. La longitud L de un objeto en movimiento con respecto a un observador aparece siempre a los ojos de éste como menor que su longitud L_0 cuando está en reposo con respecto a él, fenómeno que se conoce como *contracción de Lorentz-Fitzgerald*. Esta contracción ocurre únicamente en la dirección del movimiento relativo. La longitud L_0 de un objeto en su sistema de reposo recibe el nombre de *longitud propia*.

Para investigar la contracción de Lorentz, podemos utilizar el reloj luminoso de la sección anterior. Con este fin, imaginemos que el reloj está orientado de manera que el pulso de luz se desplaza hacia arriba y hacia abajo paralelo a la dirección en la cual se mueve el reloj con respecto al observador (Fig. 1-10). En $t = 0$ el pulso de luz parte del espejo posterior y llega al anterior en t_1. El pulso ha recorrido la distancia ct_1 para llegar al espejo frontal, de donde, según el diagrama

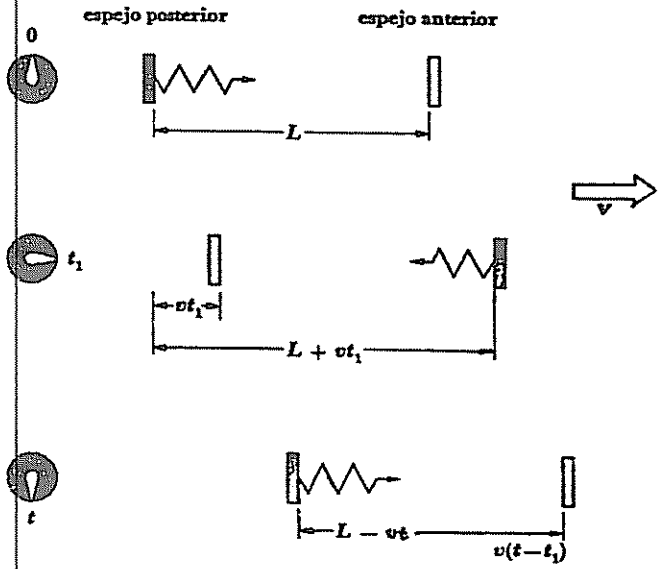


FIGURA 1-10 Reloj luminoso en una nave espacial visto por un observador desde la Tierra. Los espejos son perpendiculares a la dirección del movimiento de la nave espacial.

$$ct_1 = L + vt_1$$

Por tanto

1.7 $$t_1 = \frac{L}{c - v}$$

donde L es la distancia entre los espejos medida por el observador en reposo.

Así, el pulso se refleja en el espejo frontal y regresa hacia el posterior en el tiempo t, después de recorrer la distancia $c(t - t_1)$, donde

$$c(t - t_1) = L - v(t - t_1)$$

Así que el intervalo de tiempo total t, determinado desde la Tierra, es

1.8 $$t = \frac{L}{c + v} + t_1$$

Eliminamos t_1 con ayuda de la ecuación 1.7 y encontramos que

$$t = \frac{L}{c + v} + \frac{L}{c - v}$$

$$= \frac{2Lc}{(c + v)(c - v)}$$

$$= \frac{2Lc}{c^2 - v^2}$$

1.9 $$= \frac{2L/c}{1 - v^2/c^2}$$

La ecuación 1.9 da el intervalo de tiempo t entre tics del reloj en movimiento medido por un observador desde la Tierra.

Anteriormente encontramos otra expresión para t,

(1.5) $$t = \frac{2L_0/c}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

que está en función de L_0, la distancia propia entre los espejos, y no en función de L, la distancia medida por un observador en movimiento relativo. Las dos fórmulas deben ser equivalentes, por lo que tenemos

$$\frac{2L/c}{1 - v^2/c^2} = \frac{2L_0/c}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

1.10 $$L = L_0\sqrt{1 - v^2/c^2}$$

Contracción de Lorentz

Como la velocidad relativa aparece únicamente como v^2 en la Ec. 1.10, la contracción de Lorentz es un efecto recíproco. A un hombre en un cohete espacial, los objetos de la Tierra le parecen más cortos de lo que le parecían cuando él estaba en la Tierra por el mismo factor, $\sqrt{1 - v^2/c^2}$, que la nave espacial parece acortarse para alguien que se encuentre en reposo. La longitud propia de un objeto es la longitud máxima que puede medir cualquier observador.

La contracción relativista de la longitud es despreciable para velocidades ordinarias, pero es un efecto importante a velocidades próximas a la de la luz. Una velocidad de 1,000 mi/s nos parece enorme y, sin embargo, produce un acortamiento en la dirección del movimiento de sólo

$$\frac{L}{L_0} = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

$$= \sqrt{1 - \frac{(1{,}000 \text{ mi/s})^2}{(186{,}000 \text{ mi/s})^2}}$$

$$= 0.999985$$

$$= 99.9985 \text{ por ciento}$$

de la longitud en reposo. Por otra parte, un cuerpo que se desplaza a 0.9 veces la velocidad de la luz se acorta en

$$\frac{L}{L_0} = \sqrt{1 - \frac{(0.9c)^2}{c^2}} = 0.436$$

$$= 43.6 \text{ por ciento}$$

de su longitud en reposo, lo que es un cambio importante.

www.elsolucionario.org

La relación entre L y L_0 en la Ec. 1.10 es la misma que en la Ec. 1.3 cuando se aplica a los tiempos de desplazamiento de los 2 rayos luminosos, de manera que podríamos inclinarnos a interpretar que el resultado de Michelson-Morley solamente constituye una prueba de la contracción de la longitud del instrumento en la dirección del movimiento de la Tierra. Esta interpretación la demostraron Kennedy y Thorndike en un experimento similar utilizando un interferómetro con brazos de longitud desigual. También encontraron que no había desplazamiento de franjas, lo que significa que estos experimentos se deben considerar como una prueba de que no existe el éter, con todas sus implicaciones, y no solamente como prueba de la contracción del instrumento.

Una fotografía real de un objeto en movimiento relativo muy rápido podría revelar una distorsión algo diferente, dependiendo de la dirección desde la que se ve el objeto y de la relación v/c. La razón de este efecto es que la luz que llega a la cámara (o al ojo, en su caso) desde las partes más distantes del objeto se emitió antes que la procedente de las partes más cercanas; la cámara "ve" una imagen que en realidad es una composición, ya que el objeto estaba en posiciones diferentes cuando partieron de él los distintos elementos de la imagen única que llega a la película. Este efecto contrarresta la contracción de Lorentz alargando la longitud aparente de un objeto móvil en la dirección del movimiento. Por tanto, se puede ver un cuerpo tridimensional, como un cubo, como si hubiera girado su orientación y cambiado su forma, dependiendo otra vez de la posición del observador y del valor de v/c. Este resultado se debe distinguir de la propia contracción de Lorentz, que es un fenómeno físico. Si no existiera la contracción de Lorentz, la apariencia de un cuerpo en movimiento sería diferente de la que tendría en reposo, pero de otra manera.

Es interesante señalar que el análisis descrito sobre la apariencia visual de objetos en movimiento rápido, se realizó hasta 1959, o sea, 54 años después de la publicación de la teoría especial de la relatividad.

1.6 LA DESINTEGRACION DEL MESON

Tenemos un ejemplo notable tanto de la dilatación del tiempo como de la contracción de la longitud en la desintegración de partículas inestables llamadas *mesones* μ, cuyas propiedades estudiaremos posteriormente con mayor detalle. Por el momento, nuestro interés estriba en el hecho de que un mesón μ se desintegra en un electrón, en promedio, 2×10^{-6} s después de haber iniciado su existencia. Ahora se están creando mesones μ en lo alto de la atmósfera mediante la acción de partículas rápidas de rayos cósmicos que llegan a la Tierra desde el espacio y alcanzan el nivel del mar en grandes cantidades. Estos mesones tienen una velocidad característica de 2.994×10^8 m/s, que es 0.998 de la velocidad de la luz c. Pero en $t_0 = 2 \times 10^{-6}$ s, que es la vida media del mesón, pueden recorrer tan sólo una distancia de

$$\begin{aligned} y &= vt_0 \\ &= 2.994 \times 10^8 \text{ m/s} \times 2 \times 10^{-6} \text{ s} \\ &= 600 \text{ m} \end{aligned}$$

mientras que en realidad se están creando a alturas 10 veces mayores que este valor.

Podemos resolver la paradoja del mesón utilizando los resultados de la teoría especial de la relatividad. Examinemos el problema desde el sistema de referencia del mesón, en el que su vida media es de 2×10^{-6} s. En este caso, la distancia desde el mesón a la Tierra aparece acortada por el factor

$$\frac{y}{y_0} = \sqrt{1 - v^2/c^2}$$

Es decir, mientras nosotros, sobre la Tierra, medimos la altura a la que se produce el mesón, como y_0, el mesón la "ve" como y. Si hacemos y igual a 600 m, distancia máxima que el mesón puede recorrer *en su propio sistema de referencia* a la velocidad de $0.998c$ antes de desintegrarse, encontramos que la distancia correspondiente y_0 *en nuestro marco de referencia* es

$$\begin{aligned} y_0 &= \frac{y}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \\ &= \frac{600}{\sqrt{1 - \dfrac{(0.998c)^2}{c^2}}} \text{ m} \\ &= \frac{600}{\sqrt{1 - 0.996}} \text{ m} \\ &= \frac{600}{0.063} \text{ m} \\ &= 9\,500 \text{ m} \end{aligned}$$

De aquí que sea posible, a pesar de su breve vida media, que los mesones lleguen a la Tierra desde la altura en que se producen.

Examinemos ahora el problema desde el sistema de referencia de un observador sobre la Tierra. Desde ésta, la altura a la que se produce el mesón es y_0, pero su vida media *en nuestro sistema de referencia* se ha alargado, debido al movimiento relativo, hasta alcanzar el valor

$$\begin{aligned} t &= \frac{t_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \\ &= \frac{2 \times 10^{-6}}{\sqrt{1 - \dfrac{(0.998c)^2}{c^2}}} \text{ s} \end{aligned}$$

$$= \frac{2 \times 10^{-6}}{0.063}\,\text{s}$$

$$= 31.7 \times 10^{-6}\,\text{s}$$

que es casi 16 veces mayor que cuando está en reposo con respecto a nosotros. En 31.7×10^{-6} s, un mesón cuya velocidad es $0.998c$ puede recorrer una distancia

$$y_0 = vt$$
$$= 2.994 \times 10^8\,\text{m/s} \times 31.7 \times 10^{-6}\,\text{s}$$
$$= 9\,500\,\text{m}$$

que es la misma distancia que se obtuvo anteriormente. Los dos puntos de vista conducen a resultados idénticos.

*1.7 LA TRANSFORMACION DE LORENTZ

Supongamos que estamos en un sistema de referencia S y encontramos que las coordenadas de un evento que ocurre en el tiempo t son x, y, z. Un observador situado en un sistema de referencia diferente S' que se mueve con respecto a S a la velocidad constante v, encontrará que el mismo evento ocurre en el tiempo t' y sus coordenadas son x', y', z'. (Para simplificar nuestro trabajo consideraremos que v está en la dirección $+x$, como en la Fig. 1.11.) ¿Cómo son las mediciones x,y,z,t con respecto a x', y', z', t'?

Si desconocemos la teoría especial de la relatividad, la respuesta parece demasiado evidente. Si el tiempo en ambos sistemas se mide desde el instante en que coinciden los orígenes de S y S', las mediciones en la dirección de x efectuadas en S excederán a las efectuadas en S' en la cantidad vt, que representa la distancia que ha recorrido S' en la dirección de x. Es decir,

1.11 $$x' = x - vt$$

No existe movimiento relativo en las direcciones y y z, por tanto

1.12 $$y' = y$$

1.13 $$z' = z$$

Como nuestra experiencia cotidiana no nos indica lo contrario, consideremos además que

1.14 $$t' = t$$

Al conjunto de ecuaciones desde la 1.11 hasta la 1.14 se le conoce como la *transformación de Galileo*.

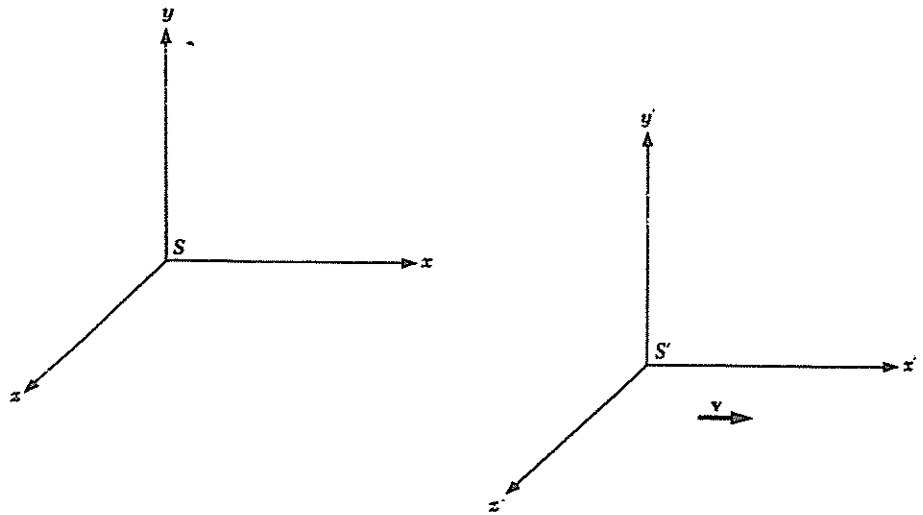


FIGURA 1-11 El sistema S' se mueve en el sentido $+x$ a la velocidad v con respecto al sistema S.

Para convertir las componentes de velocidad medidas en el sistema S a sus equivalentes en el sistema S', de acuerdo con la transformación de Galileo, basta con derivar x', y' y z' con respecto al tiempo:

1.15 $$v'_x = \frac{dx'}{dt'} = v_x - v$$

1.16 $$v'_y = \frac{dy'}{dt'} = v_y$$

1.17 $$v'_z = \frac{dz'}{dt'} = v_z$$

Aunque la transformación de Galileo y la transformación de velocidad que se deduce de ésta concuerdan con nuestra intuición, violan, sin embargo, los dos postulados de la relatividad especial. El primer postulado exige idénticas ecuaciones de la física en los dos sistemas de referencia S y S', pero las ecuaciones fundamentales de electricidad y magnetismo adoptan formas muy diferentes cuando se aplica la transformación de Galileo para convertir las cantidades medidas en un sistema en sus equivalentes en el otro. El segundo postulado exige el mismo valor para la velocidad de la luz c tanto si está determinado en S como en S'. Sin embargo, si la velocidad de la luz medida en la dirección x del sistema S es c, en el sistema S' resultará

$$c' = c - v$$

de acuerdo con la Ec. 1.15. Resulta claro que, para satisfacer los postulados de la relatividad especial, es necesaria una transformación diferente. Podríamos esperar que tanto la dilatación del tiempo como la contracción de la longitud se deducen en forma natural de esta nueva transformación.

Una suposición razonable respecto de la relación correcta entre x y x' es

1.18 $$x' = k(x - vt)$$

donde k es un factor de proporcionalidad que no depende de x ni de t, pero que puede ser función de v. La elección de la Ec. 1.18 se debe a varias consideraciones:

1. Es lineal en x y x', de forma que un único evento en el sistema S corresponde a un único evento en el sistema S', como se requiere.

2. Es sencilla, y siempre se debe examinar primero una solución sencilla a un problema.

3. Puede reducirse a la Ec. 1.11, que sabemos es correcta en la mecánica ordinaria.

Como las ecuaciones físicas deben tener la misma forma tanto en S como en S', basta con cambiar el signo de v (para tener en cuenta la diferencia de sentido del movimiento relativo) y se obtiene la ecuación correspondiente para x en función de x' y t':

1.19 $$x = k(x' + vt')$$

El factor k debe ser el mismo en ambos sistemas de referencia ya que no existe más diferencia entre S y S' que el signo de v.

Como en el caso de la transformación de Galileo, nada indica que pueda haber diferencias entre las coordenadas correspondientes y, y' y z, z', que son normales a la dirección de v. Por tanto, también en este caso tomamos

1.20 $$y' = y$$

1.21 $$z' = z$$

Sin embargo, las coordenadas de tiempo t y t' *no* son iguales. Podemos comprobar esto sustituyendo el valor de x' dado por la Ec. 1.18 en la Ec. 1.19. Obtenemos

$$x = k^2(x - vt) + kvt'$$

donde vemos que

1.22 $$t' = kt + \left(\frac{1 - k^2}{kv}\right)x$$

Las Ecs. 1.18, 1.20, 1.21 y 1.22 constituyen una transformación de coordenadas que satisface el primer postulado de la relatividad especial.

El segundo postulado nos permite calcular k. En el instante $t = 0$, los orígenes de los dos sistemas de referencia S y S' están en el mismo lugar, de acuerdo con nuestras condiciones iniciales y, por tanto, también $t' = 0$. Supongamos que se enciende una bengala en el origen común de S y S' cuando $t = t' = 0$, y que los observadores de cada sistema proceden a medir la velocidad de expansión de la luz desde ella. Ambos observadores deben encontrar la misma velocidad c, lo que quiere decir que en el sistema S

1.23 $$x = ct$$

mientras que en el sistema S'

1.24 $$x' = ct'$$

Sustituyendo x' y t' en la Ec. 1.24 con ayuda de las Ecs. 1.18 y 1.22,

$$k(x - vt) = ckt + \left(\frac{1 - k^2}{kv}\right)cx$$

y despejando x

$$x = \frac{ckt + vkt}{k - \left(\frac{1 - k^2}{kv}\right)c}$$

$$= ct\left[\frac{k + \frac{v}{c}k}{k - \left(\frac{1 - k^2}{kv}\right)c}\right]$$

$$= ct\left[\frac{1 + \frac{v}{c}}{1 - \left(\frac{1}{k^2} - 1\right)\frac{c}{v}}\right]$$

Esta expresión de x será la misma que la correspondiente a la Ec. 1.23, es decir, $x = ct$, siempre que la cantidad entre paréntesis sea igual a 1. Por tanto,

$$\frac{1 + \frac{v}{c}}{1 - \left(\frac{1}{k^2} - 1\right)\frac{c}{v}} = 1$$

y

1.25 $$k = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Introduciendo el valor de k, arriba indicado, en las Ecs. 1.18 y 1.22 tenemos, para la transformación completa de las mediciones de un evento ocurrido en S en las mediciones correspondientes realizadas en S', las ecuaciones

www.elsolucionario.org

1.26 $$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

1.27 $$y' = y$$

1.28 $$z' = z$$

Transformación de Lorentz

1.29 $$t' = \frac{t - \frac{vx}{c^2}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Estas ecuaciones comprenden la *transformación de Lorentz*. Las obtuvo por primera vez el físico holandés H. A. Lorentz, quien demostró que las fórmulas fundamentales del electromagnetismo son las mismas en todos los sistemas de referencia en movimiento relativo uniforme solamente cuando se utilizan estas ecuaciones de transformación. Todavía transcurrieron algunos años hasta que Einstein descubrió su pleno significado. Es evidente que la transformación de Lorentz se reduce a la transformación de Galileo cuando la velocidad relativa v es pequeña, comparada con la velocidad de la luz c.

De la transformación de Lorentz se deduce directamente la contracción relativista de la longitud. Consideremos una barra a lo largo del eje x' en el sistema en movimiento S'. Un observador en este sistema determina que las coordenadas de los extremos son x'_1 y x'_2, y, por tanto, la longitud propia de la barra es

$$L_0 = x'_2 - x'_1$$

Con el fin de encontrar $L = x_2 - x_1$, la longitud de la barra medida en el sistema estacionario S en el tiempo t, utilizamos la Ec. 1.26. Tenemos

$$x'_1 = \frac{x_1 - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

$$x'_2 = \frac{x_2 - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

así que

$$\begin{aligned} L &= x_2 - x_1 \\ &= (x'_2 - x'_1)\sqrt{1 - v^2/c^2} \\ &= L_0\sqrt{1 - v^2/c^2} \end{aligned}$$

que es igual a la Ec. 1.10.

*1.8 LA TRANSFORMACION INVERSA DE LORENTZ

En la sección anterior, las coordenadas de los extremos de la barra en movimiento se midieron en el sistema estacionario S en el mismo tiempo t, y se utilizó la Ec. 1.26 para encontrar L en función de L_0 y v. Si queremos determinar la dilatación del tiempo, no es conveniente utilizar la Ec. 1.29 porque t_1 y t_2, el principio y el final del intervalo de tiempo, deben medirse cuando el reloj en movimiento esté en las respectivas posiciones *diferentes* x_1 y x_2. En situaciones de este tipo es preferible utilizar la *transformación inversa de Lorentz* que convierte mediciones efectuadas en el sistema móvil S' en sus equivalentes en S. Para obtener la transformación inversa se cambian las cantidades prima y no prima en las ecuaciones 1.26 hasta 1.29 y se sustituye v por $-v$:

1.30 $$x = \frac{x' + vt'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

1.31 $$y = y'$$

1.32 $$z = z'$$

Transformación inversa de Lorentz

1.33 $$t = \frac{t' + \frac{vx'}{c^2}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Consideremos un reloj en el punto x' del sistema en movimiento S'. Cuando un observador en S' encuentra que el tiempo es t'_1, un observador en S encontrará que es t_1, donde, a partir de la Ec. 1.33,

$$t_1 = \frac{t'_1 + \frac{vx'}{c^2}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Después de un intervalo de tiempo de t_0 (para él), el observador del sistema móvil encuentra que el tiempo en este momento es t'_2 según su reloj. Es decir,

$$t_0 = t'_2 - t'_1$$

El observador en S, sin embargo, mide que el final del mismo intervalo es

$$t_2 = \frac{t'_2 + \frac{vx'}{c^2}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

por tanto, para él la duración del intervalo t es

$$t = t_2 - t_1$$
$$= \frac{t_2' - t_1'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

o bien,

$$t = \frac{t_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

como encontramos anteriormente con ayuda del reloj de pulsos luminosos.

*1.9 SUMA DE VELOCIDADES

Uno de los postulados de la relatividad especial establece que la velocidad de la luz, c, es la misma en el espacio libre para todos los observadores, independientemente de su movimiento relativo. Pero el "sentido común" nos dice que si arrojamos hacia adelante una pelota a 50 m/seg desde un coche que se mueve a 80 m/seg, la velocidad relativa de la pelota con respecto al suelo es de 130 m/seg, que es igual a la suma de las dos velocidades. De aquí que nos parezca que un rayo de luz emitido en un sistema de referencia S', en la dirección del movimiento de éste, a la velocidad v con respecto a otro sistema S, deberá tener una velocidad de $c+v$ medida en S, lo que está en contradicción con el postulado anterior. El "sentido común" como guía en la ciencia no es más de fiar que en cualquier otro campo, y debemos recurrir a las ecuaciones de la transformación de Lorentz para obtener el esquema correcto de suma de velocidades.

Consideremos algo en movimiento con respecto tanto de S como de S'. Un observador en S, al medir las tres componentes de su velocidad, obtiene los valores

$$V_x = \frac{dx}{dt} \qquad V_y = \frac{dy}{dt} \qquad V_z = \frac{dz}{dt}$$

mientras que un observador en S' obtiene

$$V_x' = \frac{dx'}{dt'} \qquad V_y' = \frac{dy'}{dt'} \qquad V_z' = \frac{dz'}{dt'}$$

Diferenciando las ecuaciones de la transformación inversa de Lorentz para x, y, z y t, obtenemos

$$dx = \frac{dx' + v\,dt'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$
$$dy = dy'$$
$$dz = dz'$$

$$dt = \frac{dt' + \frac{v\,dx'}{c^2}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

y, por tanto

$$V_x = \frac{dx}{dt}$$
$$= \frac{dx' + v\,dt'}{dt' + \frac{v\,dx'}{c^2}}$$
$$= \frac{\frac{dx'}{dt'} + v}{1 + \frac{v}{c^2}\frac{dx'}{dt'}}$$

1.34
$$= \frac{V_x' + v}{1 + \frac{vV_x'}{c^2}}$$

Transformación relativista de la velocidad

Igualmente

1.35
$$V_y = \frac{V_y'\sqrt{1 - v^2/c^2}}{1 + \frac{vV_x'}{c^2}}$$

1.36
$$V_z = \frac{V_z'\sqrt{1 - v^2/c^2}}{1 + \frac{vV_x'}{c^2}}$$

Si $V_x' = c$, es decir, si se emite un rayo de luz en el sistema de referencia S' que se mueve en su dirección de movimiento hacia S, un observador en S medirá la velocidad

$$V_x = \frac{V_x' + v}{1 + \frac{vV_x'}{c^2}}$$
$$= \frac{c + v}{1 + \frac{vc}{c^2}}$$
$$= \frac{c(c + v)}{c + v}$$
$$= c$$

Ambos observadores, como se esperaba, determinan el mismo valor de la velocidad de la luz.

La transformación relativista de la velocidad tiene otras consecuencias peculiares. Supongamos, por ejemplo, que queremos rebasar a una nave

espacial, cuya velocidad con respecto a la Tierra es $0.9c$, a una velocidad relativa de $0.5c$. De acuerdo con la mecánica convencional, deberíamos llevar una velocidad relativa con respecto a la Tierra de $1.4c$, o sea, mayor que la velocidad de la luz. Sin embargo, de acuerdo con la ecuación 1.34, para $V'_x = 0.5c$ y $v = 0.9c$, la velocidad necesaria es

$$V_x = \frac{V'_x + v}{1 + \frac{vV'_x}{c^2}}$$

$$= \frac{0.5c + 0.9c}{1 + \frac{(0.9c)(0.5c)}{c^2}}$$

$$= 0.9655c$$

que es un valor inferior a c. Debemos ir menos del 10% más rápido que una nave espacial que viaje a $0.9c$ para rebasarla con una velocidad relativa de $0.5c$.

1.10 LA RELATIVIDAD DE LA MASA

Hasta ahora sólo hemos considerado aspectos puramente cinemáticos de la relatividad especial. Las consecuencias dinámicas de la relatividad son igualmente notorias, incluyendo la variación de la masa con respecto a la velocidad y la equivalencia de la masa y la energía.

Comenzamos considerando un choque elástico (es decir, un choque en el que se conserva la energía cinética) entre dos partículas A y B, vista por observadores situados en los sistemas de referencia S y S' que se encuentran en movimiento relativo uniforme. Las propiedades de A y B son idénticas cuando se les determina en sistemas de referencia en los que se encuentran en reposo. Los sistemas S y S' están orientados según la Fig. 1-12, y S' se mueve en el sentido $+x$ con respecto a S a la velocidad v.

Antes del choque, la partícula A se encuentra en reposo en el sistema S y la partícula B en el sistema S'. Así, en el mismo instante, A se lanza en el sentido $+y$ a la velocidad V_A, mientras que B se lanza en el sentido $-y'$ a la velocidad V'_B, donde

$$V_A = V'_B \tag{1.37}$$

De aquí que el comportamiento de A, visto desde S, sea exactamente el mismo que el de B visto desde S'. Cuando las dos partículas chocan, A rebota en el sentido $-y$ a la velocidad V_A, mientras que B rebota en el sentido $+y'$ a la velocidad V'_B. Si las partículas se lanzan desde posiciones separadas por una distancia Y, a un observador en S le parecerá que el choque ocurre en

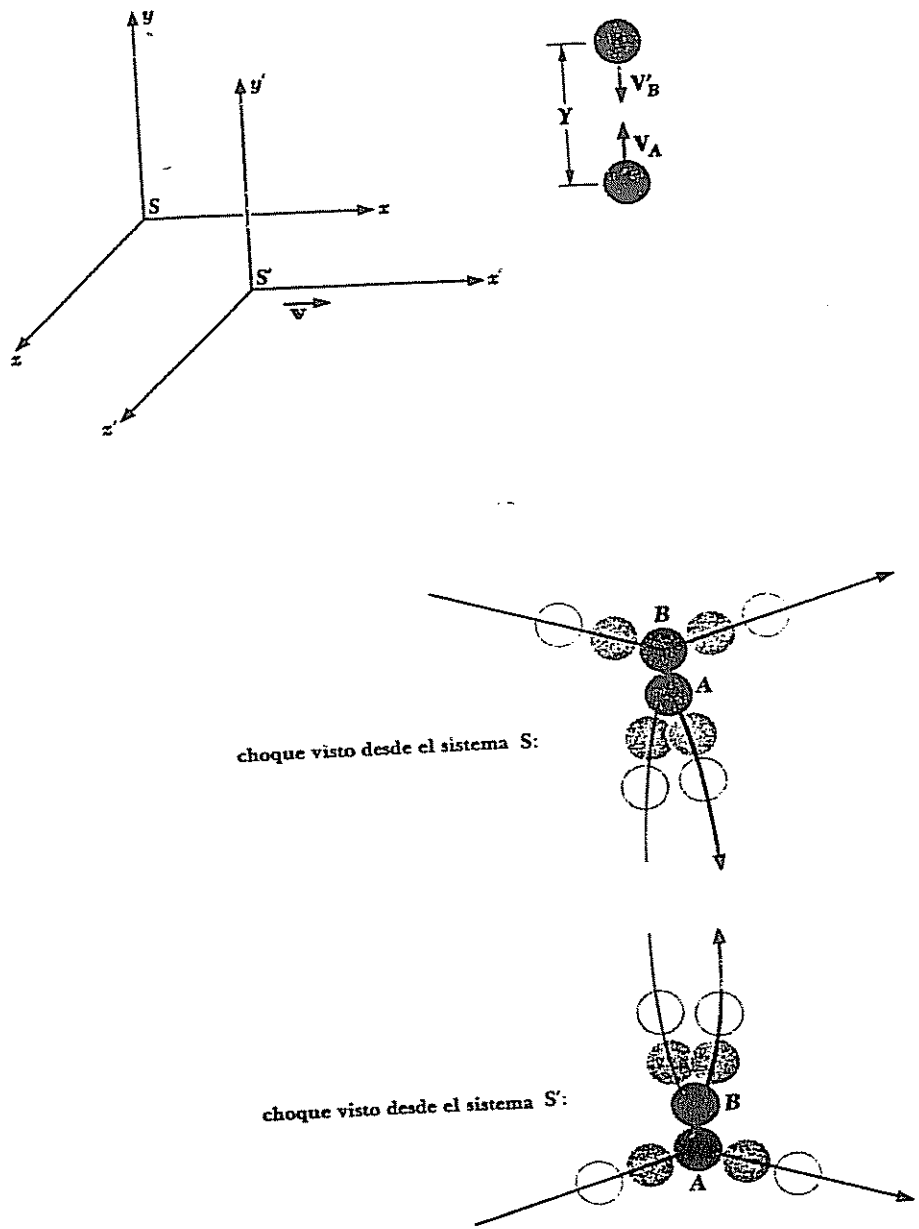


FIGURA 1-12 Choque elástico según se observa desde dos sistemas de referencia diferentes.

www.elsolucionario.org

$y = \frac{1}{2}Y$, y a uno en S' le parecerá que ocurre en $y' = \frac{1}{2}Y$. El tiempo T_0 que invierte A en el recorrido de ida y vuelta, medido en el sistema S, es, por tanto,

1.38 $$T_0 = \frac{Y}{V_A}$$

y es el mismo para B en S',

$$T_0 = \frac{Y}{V'_B}$$

Si se conserva el momentum en el sistema S, entonces, es cierto que

1.39 $$m_A V_A = m_B V_B$$

donde m_A y m_B son las masas de A y B, y V_A y V_B sus velocidades *medidas en el sistema S*. En S, la velocidad V_B tiene por valor

1.40 $$V_B = \frac{Y}{T}$$

donde T es el tiempo que tarda B en efectuar su recorrido de ida y vuelta *medido en S*. Sin embargo, en S', el recorrido de B requiere el tiempo T_0, donde

1.41 $$T = \frac{T_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

lo que está de acuerdo con nuestros resultados anteriores. Aunque los observadores en ambos sistemas ven el mismo evento, discrepan en cuanto al intervalo de tiempo que la partícula lanzada desde el otro sistema requiere para efectuar el choque y volver.

Sustituyendo T en la Ec. 1.40 por su equivalente en función de T_0, tenemos

$$V_B = \frac{Y\sqrt{1 - v^2/c^2}}{T_0}$$

De la Ec. 1.38

$$V_A = \frac{Y}{T_0}$$

sustituyendo estas expresiones de V_A y V_B en la Ec. 1.39, vemos que el momentum se conserva con tal que

1.42 $$m_A = m_B\sqrt{1 - v^2/c^2}$$

Según nuestra hipótesis original, A y B eran idénticas cuando se encontraban en reposo con respecto a un observador; por tanto, la diferencia entre m_A y m_B significa que las mediciones de masa, así como las de espacio y tiempo, dependen de la velocidad relativa entre el observador y lo que él observa.

En el ejemplo anterior, tanto A como B se mueven en S. Para obtener una fórmula que exprese la masa m de un cuerpo medida mientras está en movimiento en función de su masa m_0 que se mide cuando está en reposo, es suficiente con considerar un ejemplo en el que V_A y V'_B sean muy pequeñas. En este caso, un observador en S verá cómo B se aproxima a A con la velocidad v, choca de refilón (ya que $V'_B \ll v$) y continúa. En S

$$m_A = m_0$$

y

$$m_B = m$$

por lo que

1.43 $$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$ Masa relativista

La masa de un cuerpo que se mueve a la velocidad v con respecto a un observador, es mayor que su masa cuando está en reposo con respecto al mismo observador debido al factor $1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$. Este incremento de masa es recíproco; para un observador en S'

$$m_A = m$$

y

$$m_B = m_0$$

Medida desde la Tierra, una nave espacial en vuelo es más corta que otra nave gemela sobre la Tierra, y su masa es mayor. A un observador que vaya en la nave en vuelo le parecerá también que la nave de la Tierra es más corta y que tiene mayor masa. (Este efecto es, desde luego, muy pequeño para las velocidades reales de los cohetes.) La Ec. 1.43 se representa en la Fig. 1-13.

Con tal que se defina su momentum por

1.44 $$mv = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

la conservación del momentum es válida en la relatividad especial, al igual que en física clásica. Sin embargo, la segunda ley de Newton, del movimiento, es correcta solamente en la forma

$$F = \frac{d}{dt}(mv)$$

1.45 $$= \frac{d}{dt}\left[\frac{m_0 v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\right]$$

Esto *no* equivale a decir que

$$F = ma$$

$$= m\frac{dv}{dt}$$

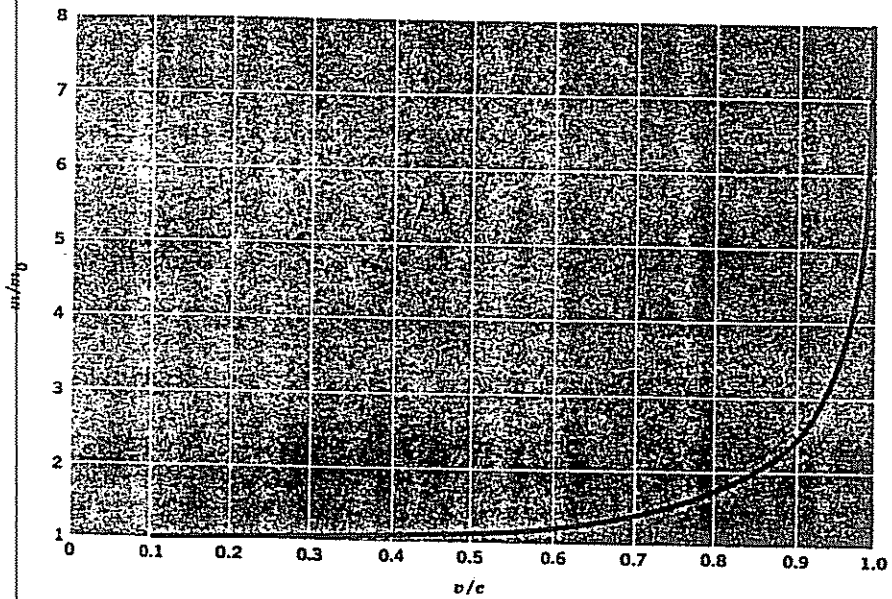


FIGURA 1-13 La relatividad de la masa.

aunque m venga dada por la Ec. 1.43, porque

$$\frac{d}{dt}(mv) = m\frac{dv}{dt} + v\frac{dm}{dt}$$

y dm/dt no se anula si la velocidad del cuerpo varía con el tiempo. La fuerza resultante sobre un cuerpo es siempre igual a la velocidad de variación de su momentum.

Los incrementos de masa relativista sólo son significativos a velocidades próximas a la de la luz. A una décima parte de la velocidad de la luz, el incremento de masa es únicamente de 0.5%, pero este incremento es mayor que el 100% a nueve décimas de la velocidad de la luz. Solamente las partículas atómicas, como los electrones, los protones, los mesones, etc., tienen velocidades suficientemente altas como para que sean medibles los efectos relativistas y, al estudiar estas partículas, no se pueden utilizar las leyes de la física "ordinaria". Históricamente, la primera confirmación de la Ec. 1.43 fue el descubrimiento, hecho por Bücherer en 1908, de que la relación e/m de la carga del electrón a su masa es menor para electrones rápidos que para lentos; esta ecuación, al igual que otras de la relatividad especial, se ha comprobado mediante infinidad de experimentos, por lo que en la actualidad se le tiene como una de las fórmulas fundamentales de la física.

1.11 MASA Y ENERGIA

La relación más célebre que Einstein obtuvo de los postulados de la relatividad especial se refiere a la masa y la energía. Esta relación se puede deducir directamente de la definición de energía cinética T de un cuerpo en movimiento, como el trabajo realizado para llevarle del reposo a su estado de movimiento. Es decir,

$$T = \int_0^s F\,ds$$

donde F es la componente de la fuerza aplicada en la dirección del desplazamiento ds y s es la distancia sobre la que actúa la fuerza. Utilizando la forma relativista de la segunda ley del movimiento

$$F = \frac{d(mv)}{dt}$$

la expresión de la energía cinética se convierte en

$$\begin{aligned} T &= \int_0^s \frac{d(mv)}{dt}\,ds \\ &= \int_0^{mv} v\,d(mv) \\ &= \int_0^v v\,d\left(\frac{m_0 v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\right) \end{aligned}$$

Integrando por partes ($\int x\,dy = xy - \int y\,dx$),

$$\begin{aligned} T &= \frac{m_0 v^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - m_0 \int_0^v \frac{v\,dv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \\ &= \frac{m_0 v^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} + m_0 c^2 \sqrt{1 - v^2/c^2}\,\Bigg|_0^v \\ &= \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - m_0 c^2 \\ &= mc^2 - m_0 c^2 \end{aligned} \qquad 1.46$$

La ecuación 1.46 establece que la energía cinética de un cuerpo es igual al incremento de su masa como consecuencia de su movimiento relativo multiplicado por el cuadrado de la velocidad de la luz.

La ecuación 1.46 se puede volver a escribir en la forma

$$mc^2 = T + m_0 c^2 \qquad 1.47$$

Si interpretamos a mc^2 como la *energía total* E del cuerpo, se deduce que cuando el cuerpo está en reposo y $T = 0$, posee, no obstante, la energía $m_0 c^2$.

Por tanto, m_0c^2 recibe el nombre de *energía en reposo* E_0 de un cuerpo cuya masa en reposo es m_0. La ecuación 1.47 toma la forma

$$E = E_0 + T$$

donde

1.48 $$E_0 = m_0c^2$$

Energía en reposo

Además de sus manifestaciones cinética, potencial, electromagnética, térmica y otras que nos son comunes, la energía se puede manifestar también como masa. El factor de conversión entre la unidad de masa, kilogramos (kg), y la unidad de energía joule (J), es c^2, de manera que 1 kg de materia contiene una energía de 9×10^{16} J. Aun una diminuta porción de materia representa una gran cantidad de energía y, en realidad, la conversión de materia a energía es la fuente de la potencia liberada en todas las reacciones exotérmicas de la física y la química.

Como la masa y la energía no son entidades independientes, los principios establecidos separadamente —conservación de la energía y de la masa— constituyen en rigor uno solo: el principio de conservación de masa-energía. La masa se *puede* crear o destruir, pero cuando esto ocurre desaparece o aparece simultáneamente una cantidad equivalente de energía, y viceversa. Masa y energía son diferentes aspectos de la misma cosa.

Cuando la velocidad relativa v es pequeña con respecto a c, la fórmula de la energía cinética se reduce a la expresión $\frac{1}{2}m_0v^2$, que se ha comprobado experimentalmente a bajas velocidades. Veamos si esto es verdadero. Como hemos visto anteriormente, el teorema algebraico del binomio nos dice que si cierta cantidad x es mucho menor que 1,

$$(1 \pm x)^n \approx 1 \pm nx$$

La fórmula relativista de la energía cinética es

$$T = mc^2 - m_0c^2$$
$$= \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - m_0c^2$$

Desarrollando el primer término de esta fórmula con ayuda del teorema del binomio, con $v^2/c^2 \ll 1$ ya que v es mucho menor que c,

$$T = (1 + \tfrac{1}{2}v^2/c^2)m_0c^2 - m_0c^2$$
$$= \tfrac{1}{2}m_0v^2$$

De aquí que, para bajas velocidades, la expresión relativista de la energía cinética de una partícula en movimiento se reduzca a la expresión clásica. La energía total de esta partícula es

$$E = m_0c^2 + \tfrac{1}{2}m_0v^2$$

En el cálculo anterior, la relatividad ha sido sometida una vez más a una prueba importante; ha conducido exactamente a los mismos resultados que la mecánica clásica a bajas velocidades, para las que sabemos por experiencia que esta última es perfectamente válida. Sin embargo, es importante recordar que, hasta donde se sabe, la formulación correcta de la mecánica se basa en la relatividad, y con la mecánica clásica se obtiene una aproximación que es correcta únicamente en determinadas circunstancias.

A veces es conveniente expresar algunas de las fórmulas relativistas obtenidas anteriormente en formas diferentes de las originales. Las nuevas ecuaciones son tan fáciles de deducir que nos limitamos a presentarlas sin demostración:

1.49 $$E = \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2}$$

1.50 $$p = m_0c\sqrt{\frac{1}{1 - v^2/c^2} - 1}$$

1.51 $$T = m_0c^2\left(\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - 1\right)$$

1.52 $$\frac{v}{c} = \sqrt{1 - \frac{1}{[1 + (T/m_0c^2)]^2}}$$

1.53 $$\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \sqrt{1 + \frac{p^2}{m_0^2c^2}}$$

1.54 $$= 1 + \frac{T}{m_0c^2}$$

El símbolo p representa la magnitud del momentum mv.

Estas fórmulas son particularmente útiles en la física nuclear y de partículas elementales, en las que, para las partículas en movimiento, suelen especificarse sus energías cinéticas en lugar de sus velocidades. La Ec. 1.52, por ejemplo, nos permite encontrar v/c directamente a partir de T/m_0c^2, o sea, la relación entre la energía cinética y la energía en reposo de una partícula.

1.12 MASA Y ENERGIA: DERIVACION ALTERNATIVA

Se puede demostrar la equivalencia entre la masa y la energía de varias maneras diferentes. Una deducción interesante que difiere de la expuesta anteriormente, pero que también la sugirió Einstein, utiliza el concepto básico de que el centro de masa de un sistema aislado (que no experimentó interacción con lo que le rodea) no se puede alterar por ningún proceso que ocurra dentro del sistema. Para esta deducción, imaginemos una caja cerrada en uno de cuyos extremos se emite un pulso de radiación electromagnética, como se indica en la Fig. 1-14. Esta radiación es portadora de energía y momentum y, cuando se efectúa la emisión, la caja retrocede a fin de que el momentum total

www.elsolucionario.org

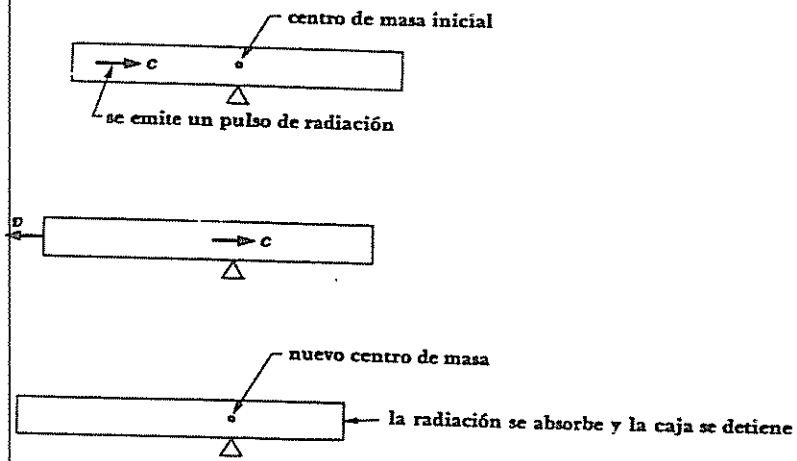


FIGURA 1-14 La energía de radiación posee masa inercial.

del sistema permanezca constante. Cuando la radiación es absorbida en el extremo opuesto de la caja, su momentum anula al de la caja que queda en reposo. Durante el tiempo de tránsito de la radiación, la caja se desplaza una distancia s. Para que el centro de masa del sistema permanezca en el mismo lugar en el espacio, la radiación debe haber transferido masa desde el extremo en que se emitió hasta el extremo en que se absorbió. Calculemos ahora la cantidad de masa que se debe transferir para que no sufra alteración el centro de masa del sistema.

Para simplificar, consideraremos que los lados de la caja carecen de masa y que cada uno de sus extremos tiene la masa $\frac{1}{2}M$. El centro de masa está, por consiguiente, en el centro de la caja, a una distancia $\frac{1}{2}L$ de cada extremo. Un pulso de radiación electromagnética que contiene una cantidad de energía E es portador del momentum E/c según la teoría electromagnética y, por hipótesis, lleva asociada una cantidad de masa m. Cuando se emite la radiación, la caja, cuya masa es ahora M-m, retrocede con velocidad v. Del principio de la conservación del momentum

$$p_{\text{caja}} = p_{\text{radiación}}$$

$$(M - m)v = \frac{E}{c}$$

por lo que la velocidad de retroceso de la caja es

$$v = \frac{E}{(M - m)c} \approx \frac{E}{Mc}$$

ya que m es mucho menor que M. El tiempo t durante el que se mueve la caja es igual al tiempo necesario para que la radiación llegue al extremo opuesto de

la caja, situado a la distancia L; esto significa que $t = L/c$ (considerando que $v \ll c$, lo que es cierto cuando $m \ll M$). Durante el tiempo t, la caja se desplaza hacia la izquierda por $s = vt = EL/Mc^2$.

Una vez que la caja se detiene, la masa de su extremo izquierdo es $\frac{1}{2}M - m$ y la masa de su extremo derecho $\frac{1}{2}M + m$, debido a la transferencia de masa m asociada a la energía E de la radiación. Para que el centro de masa quede en la misma posición original,

$$(\tfrac{1}{2}M - m)(\tfrac{1}{2}L + s) = (\tfrac{1}{2}M + m)(\tfrac{1}{2}L - s)$$

o bien,

$$m = \frac{Ms}{L}$$

Introduciendo el valor del desplazamiento s,

$$m = \frac{E}{c^2}$$

La masa asociada con la cantidad de energía E es igual a E/c^2.

En la deducción anterior hemos admitido que la caja es un cuerpo perfectamente rígido, que toda la caja comienza a moverse cuando se emite la radiación y que toda la caja se detiene cuando se absorbe la radiación. En la práctica, como es natural, no existe un cuerpo rígido que cumpla este requisito; por ejemplo, la radiación, que se desplaza a la velocidad de la luz, llegará al extremo derecho de la caja *antes* de que este extremo comience a moverse. Sin embargo, cuando mediante un cálculo más complicado se tiene en cuenta la velocidad de las ondas elásticas en la caja, se llega al mismo resultado $m = E/c^2$.

Problemas

1. Cierta partícula tiene una vida media de 10^{-7} s cuando se mide en reposo. ¿Qué distancia recorrerá antes de desintegrarse si su velocidad al crearse es de $0.99c$?

2. Un avión vuela a 300 m/s (672 mi/h). ¿Qué tiempo transcurrirá para que un reloj situado en el avión y otro en la Tierra difieran en 1 s?

3. ¿Con qué velocidad debe viajar un cohete con relación a la Tierra para que cada día en la nave corresponda a 2 días sobre la Tierra?

4. Un cohete espacial abandona la Tierra a una velocidad de $0.98c$. ¿Qué tiempo necesita el minutero de un reloj en la nave para efectuar una revolución completa si la medición la realiza un observador en la Tierra?

5. Un astronauta cuya estatura sobre la Tierra es exactamente de 1.80 m descansa en posición paralela al eje de una nave espacial que se desplaza a una velocidad de $0.9c$ con relación a la Tierra. ¿Cuál será su estatura medida por un observador en la misma nave espacial?, ¿y por un observador sobre la Tierra?

6. Se proyecta al espacio una varilla de un metro de longitud a una velocidad tan grande que su longitud aparece contraída a 50 cm. ¿A qué velocidad se desplaza en km/s?

7. Un cohete tiene, en la Tierra, una longitud de 100 m. Cuando está en vuelo, para un observador sobre la Tierra mide 99 m. ¿Cuál es su velocidad?

*8. Un observador que se mueve en el sentido $+x$ a una velocidad (dentro del sistema del laboratorio) de 2.9×10^8 m/s encuentra que la velocidad de un objeto que se mueve en el sentido $-x$ es de 2.998×10^8 m/s. ¿Cuál es la velocidad del objeto en el sistema del laboratorio?

*9. Un hombre en la Luna observa dos naves espaciales, A y B, que se dirigen hacia él en sentidos opuestos y a velocidades respectivas de $0.8c$ y $0.9c$. *a*) ¿Cuál es la velocidad con la que la nave A se acerca a la Luna medida por un hombre que viaja en esta misma nave? Según él, ¿con qué velocidad se acerca a B? *b*) ¿Cuál es la velocidad con la que la nave B se acerca a la Luna medida por un hombre que viaja en B? Según él, ¿con qué velocidad se acerca a A?

10. Es posible que el haz de electrones de un cinescopio de televisión se mueva a través de la pantalla a una velocidad superior a la de la luz. ¿Por qué no contradice esto a la relatividad especial?

11. Un hombre tiene una masa de 100 kg en la Tierra. Cuando se encuentra en un cohete en vuelo, su masa es de 101 kg para un observador en la tierra. ¿Cuál es la velocidad del cohete?

12. ¿A qué velocidad se debe mover un electrón para que su masa sea igual a la masa en reposo del protón?

13. Encuentre la velocidad de un electrón de 0.1 MeV según la mecánica clásica y la relativista.

14. ¿Cuánta masa gana un protón al ser acelerado hasta alcanzar una energía cinética de 500 MeV?

15. ¿Cuánta masa gana un electrón al ser acelerado hasta alcanzar una energía cinética de 500 MeV?

16. La energía total de una partícula es exactamente el doble de su energía en reposo. Encuentre su velocidad.

17. ¿Cuánto trabajo se debe efectuar para incrementar la velocidad de un electrón de 1.2×10^8 m/s a 2.4×10^8 m/s?

18. a) La densidad de una sustancia es ρ en el sistema S, donde se encuentra en reposo. Encuentre la densidad ρ' que determinaría un observador en el sistema S' que se mueve a velocidad relativa v con respecto a S. *b*) El oro tiene una densidad de 19.3 g/cm^3 cuando la muestra se encuentra en reposo con relación al observador. ¿Cuál es su densidad cuando la velocidad relativa es de $0.9c$?

19. Una cierta cantidad de hielo a 0°C se funde en agua a 0°C, por lo que gana 1 kg de masa. ¿Cuál era su masa inicial?

20. La dinamita libera aproximadamente 5.4×10^6 J/kg cuando explota. ¿Qué fracción de su contenido total en energía representa esta cantidad?

21. La energía solar llega a la Tierra a razón de aproximadamente 1 400 W/m^2 de superficie perpendicular a la dirección del Sol. ¿En qué cantidad disminuye la masa del Sol por segundo? (El radio promedio de la órbita terrestre es de 1.5×10^{11} m.)

22. Demostrar que $\frac{1}{2}mv^2$, con $m = m_0/\sqrt{1 - v^2/c^2}$, *no* es igual a la energía cinética de una partícula que se mueve a velocidades relativistas.

23. Expresar la forma relativista de la segunda ley del movimiento, $F = d(mv)/dt$, en función de m_0, v, c y dv/dt.

24. Un hombre abandona la Tierra en un cohete que hace el recorrido de ida y vuelta a la estrella más próxima, situada a una distancia de 4 años luz, a la velocidad de $0.9c$. A su regreso a la Tierra, ¿cuánto tiempo es más joven que su hermano gemelo que permaneció en ella? (Un año luz es la distancia que recorre la luz en un año. Es igual a 9.46×10^{15} m.)

25. Una fuente emite luz de frecuencia ν. Un observador que se aleja de la fuente a la velocidad v mide una frecuencia de ν'. Considerando a la fuente como un reloj que hace tics ν veces por segundo y emite un pulso de luz con cada tic, demostrar que

$$\nu' = \nu\sqrt{\frac{1 - v/c}{1 + v/c}}$$

Esto constituye el *efecto doppler longitudinal* en la luz. (Si el observador se mueve *hacia* la fuente a una velocidad relativa v, los signos + y − en el radical de la fórmula anterior se intercambian.) ¿Por qué difiere este resultado del correspondiente a ondas sonoras en el aire?

26. El *efecto doppler transversal*, que no tiene contraparte fuera de la relatividad, se aplica a mediciones de ondas luminosas efectuadas por un observador en movimiento relativo perpendicular a la dirección de propagación de las ondas. (En el problema anterior, el observador se mueve paralelamente a la dirección de propagación.) Demuestre que en el efecto doppler transversal

$$\nu' = \nu\sqrt{1 - v^2/c^2}$$

27. El gemelo *A* realiza un viaje de ida y vuelta, con una velocidad de $0.8c$, a una estrella que se encuentra a 4 años luz de distancia, mientras que el gemelo *B* permanece en la Tierra. Cada año, según su propio cálculo, se envían una señal entre sí. *a*) ¿Cuántas señales enviará *A* durante el viaje? ¿Cuántas enviará *B*? *b*) Use la fórmula del efecto doppler del Prob. 25 para analizar esta situación. ¿Cuántas señales recibirá *A* durante el viaje? ¿Cuántas recibirá *B*? ¿Son estos resultados comparables con los del inciso *a*)?

2 PROPIEDADES CORPUSCULARES DE LAS ONDAS

En nuestra experiencia diaria no hay nada misterioso o ambiguo sobre los conceptos de *partícula* y de *onda*. Una piedra que cae en un lago y la ondulación que se extiende desde el punto de impacto aparentemente solo tienen en común la capacidad de transportar energía y momentun de un lugar a otro. La física clásica, que refleja la "realidad física" de nuestras impresiones sensoriales, trata a las partículas y a las ondas como componentes separados de esta realidad. La mecánica de las partículas y la óptica ondulatoria han sido tradicionalmente disciplinas independientes, cada una de ellas con su propia cadena de experimentos e hipótesis.

La realidad física que percibimos proviene de fenómenos que ocurren en el mundo microscópico de los átomos y las moléculas, de los electrones y los núcleos, pero en este mundo no hay partículas ni ondas en el sentido que le aplicamos a estos términos. Consideramos a los electrones como partículas porque poseen carga y masa y se comportan según las leyes de la mecánica de partículas en instrumentos tan comunes como el cinescopio de televisión. Veremos, sin embargo, que hay tantas pruebas a favor de la interpretación de un electrón en movimiento como una manifestación ondulatoria como las hay a favor de la idea de que se trata de una partícula. Consideramos las ondas electromagnéticas como ondas porque, bajo condiciones adecuadas, dan lugar a fenómenos de difracción, interferencia y polarización. Del mismo modo, veremos que en otras condiciones las ondas electromagnéticas se comportan como si consistieran en un flujo de partículas. Junto con la relatividad especial, la dualidad onda-partícula es fundamental para comprender la física moderna, y en este libro se presentan pocos argumentos que no incluyan alguno de estos principios fundamentales.

www.elsolucionario.org

2.1 EFECTO FOTOELECTRICO

A finales del siglo XIX una serie de experimentos pusieron de manifiesto que la superficie de un metal emite electrones cuando incide sobre él luz de frecuencia suficientemente elevada (generalmente es necesaria luz ultravioleta, excepto para los metales alcalinos). Este fenómeno se conoce como *efecto fotoeléctrico.* La Fig. 2-1 muestra el tipo de aparato que se utiliza en los experimentos que requieren mayor precisión. Un tubo al vacío contiene dos electrodos conectados a un circuito externo, como se indica esquemáticamente, con la lámina metálica cuya superficie va a ser irradiada como el ánodo. Algunos de los fotoelectrones que emergen de la superficie irradiada tienen energía suficiente para alcanzar el cátodo, a pesar de su polaridad negativa, y constituyen la corriente que se mide en el amperímetro del circuito. A medida que aumenta el potencial de frenado V, menos electrones llegan al cátodo y la corriente disminuye. Al final, cuando V iguala o sobrepasa cierto valor V_0, del orden de unos cuantos volts, ningún electrón incide sobre el cátodo y la corriente cesa.

La existencia del efecto fotoeléctrico no debe sorprendernos; después de todo, las ondas luminosas transportan energía, y parte de la energía que absorbe el metal se puede concentrar de algún modo sobre algunos electrones y

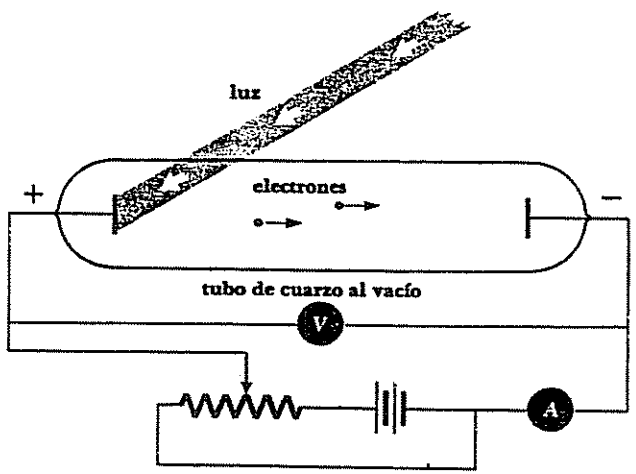


FIGURA 2-1 Observación experimental del efecto fotoeléctrico.

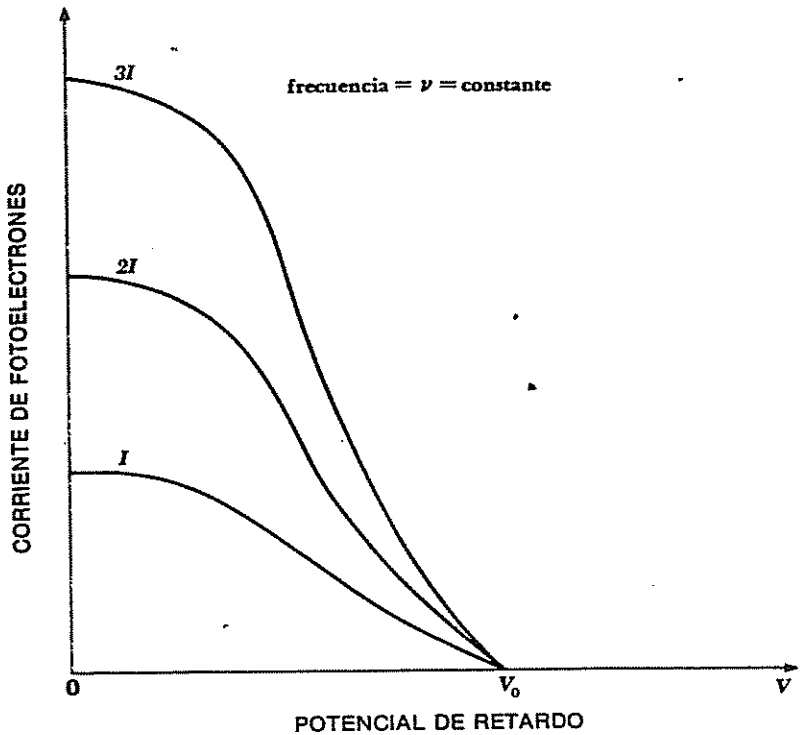


FIGURA 2-2 La corriente de fotoelectrones es proporcional a la intensidad de la luz para todos los voltajes de retardo. El voltaje de extinción V_0 es el mismo para todas las intensidades de luz de una frecuencia dada ν.

transformarse en energía cinética. Sin embargo, cuando examinamos más detalladamente el proceso, encontramos que el efecto fotoeléctrico puede difícilmente interpretarse con tanta sencillez.

Uno de los aspectos particulares del efecto fotoeléctrico que mayor confusión creó a sus descubridores fue el que la distribución de la energía en los electrones emitidos (fotoelectrones) es independiente de la intensidad de la luz. Un haz de luz intenso da lugar a más fotoelectrones que uno débil que tenga la misma frecuencia, aunque la energía media de los electrones sea la misma (Fig. 2-2). También se observa, dentro de los límites de la precisión experimental (10^{-9}s, aproximadamente), que no hay retraso de tiempo entre la llegada de la luz a la superficie metálica y la emisión de los fotoelectrones. Estas observaciones no se pueden comprender partiendo de la teoría electromagnética de la luz.

Consideremos luz violeta que incide sobre una superficie de sodio en un aparato análogo al de la Fig. 2-1. Se detectará una corriente fotoeléctrica cuando la superficie absorba 10^{-6} W/m^2 de energía electromagnética (en realidad, se necesita un haz más intenso ya que el sodio es un buen reflector de la luz). Como hay aproximadamente 10^{19} atómos en una capa de sodio de un átomo de espesor y 1 metro cuadrado de área, si suponemos que la luz incidente se absorbe en 10 de estas capas, los 10^{-6} W/m^2 se distribuyen entre los 10^{20} átomos. Por tanto, cada átomo recibe una cantidad promedio de energía de 10^{-26} W, que es menor que 10^{-7} eV/s. Se necesitarían más de 10^7 s, casi un año, para que un solo electrón acumulara una energía de 1 eV, que es la que tiene el fotoelectrón. En el tiempo máximo posible de 10^{-9} s, un electrón medio, según la teoría electromagnética, habrá ganado únicamente 10^{-16} eV. Aun si recurriéramos a algún tipo de proceso de resonancia para explicar por qué algunos electrones adquieren más energía que otros, los electrones afortunados difícilmente tendrían más de 10^{-10} de la energía observada.

Igualmente extraño, desde el punto de vista de la teoría ondulatoria, es el hecho de que la energía del fotoelectrón dependa de la *frecuencia* de la luz empleada. (Fig. 2-3). A frecuencias por debajo de cierta frecuencia crítica, característica de cada metal particular, no se emite ningún electrón. Por

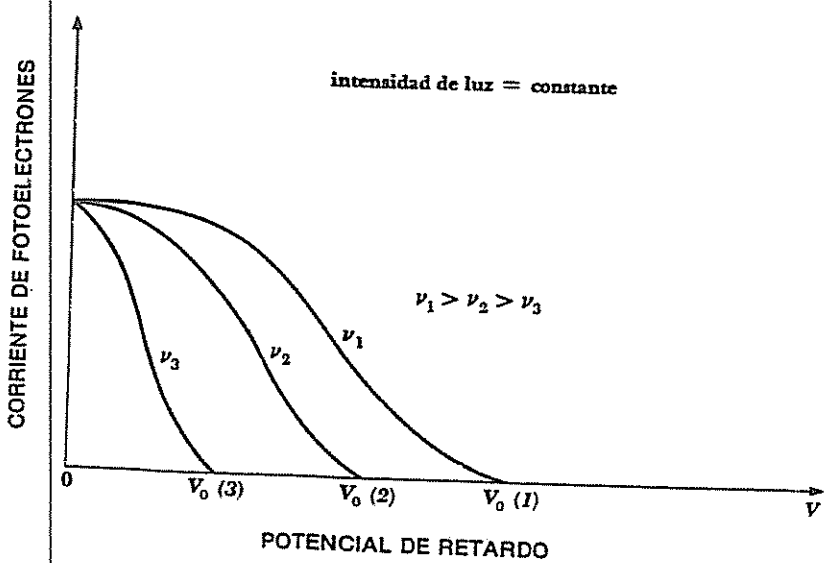


FIGURA 2-3 El voltaje de extinción V_0 depende de la frecuencia ν de la luz. Cuando el potencial de retardo es $V = 0$, la corriente fotoeléctrica es la misma para luz de una intensidad dada, independientemente de su frecuencia.

encima de este umbral de frecuencia, los fotoelectrones tienen un margen de energía que vá de 0 a un determinado valor máximo, y este máximo de energía aumenta linealmente con la frecuencia. Para altas frecuencias tenemos fotoelectrones con máximos elevados de energía y para frecuencias bajas tenemos máximos bajos de energía. De este modo, la luz azul tenue produce electrones con más energía que los que produce la luz roja brillante, aunque ésta produce mayor número de ellos.

La Fig. 2-4 es una representación de la energía máxima de los fotoelectrones, $T_{máx}$ en función de la frecuencia ν de la luz incidente en un experimento particular donde se emplea una superficie de sodio. Resulta evidente que la relación entre $T_{máx}$ y la frecuencia ν implica una proporcionalidad, que podemos expresar en la forma

$$\begin{aligned} T_{máx} &= h(\nu - \nu_0) \\ &= h\nu - h\nu_0 \end{aligned} \tag{2.1}$$

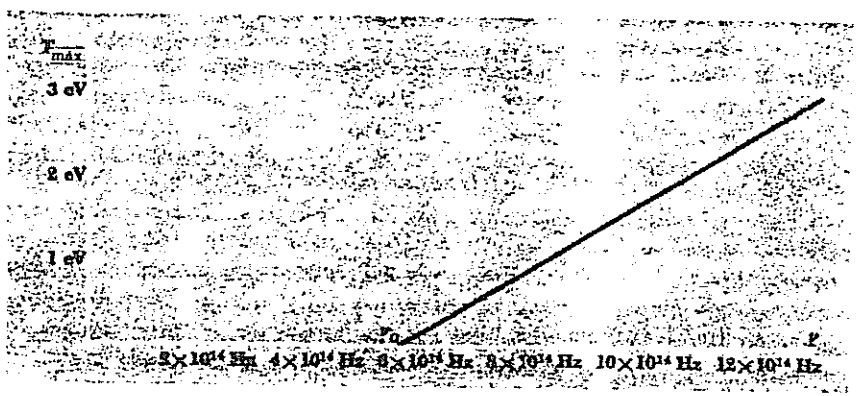


FIGURA 2-4 Energía máxima del fotoelectrón en función de la frecuencia de la luz incidente para una superficie de sodio.

donde ν_0 es el umbral de frecuencia por debajo del cual no hay fotoemisión y h es una constante. El valor de h

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J-s}$$

es *siempre el mismo*, aunque ν_0 varíe según el metal particular que se esté iluminando.

2.2 LA TEORIA CUANTICA DE LA LUZ

La teoría electromagnética de la luz explica tal cantidad de fenómenos que debe contener algo de verdad. Sin embargo, esta teoría está en completa oposición con el efecto fotoeléctrico. En 1905, Albert Einstein encontró que la paradoja que presenta el efecto fotoeléctrico podía resolverse únicamente si se tenía en cuenta una idea propuesta cinco años antes por el físico teórico alemán Max Planck. Planck intentó explicar las características de la radiación que emiten los cuerpos a temperaturas suficientemente elevadas como para ser luminosos, problema famoso en aquel tiempo por la dificultad que planteó su solución. Planck obtuvo una fórmula del espectro de esta radiación (esto es, el brillo relativo de los diversos colores presentes) en función de la temperatura del cuerpo, que concordaba con los datos experimentales. Supuso que la radiación se emitía *discontinuamente* como pequeños paquetes de energía, que reciben el nombre de *cuantos*. Planck descubrió que todos los cuantos asociados a una frecuencia determinada, ν, de la luz, tienen la misma energía, y que esta energía E es directamente proporcional a ν. Es decir

2.2 $$E = h\nu$$ Cuanto de energía

donde h se conoce ahora como la *constante de Planck* y tiene el valor

$$h = 6.626 \times 10^{-34}\ \text{J-s}$$

En el Cap. 9 se examinarán algunos detalles de este interesante problema y su resolución.

Planck supuso que la energía electromagnética que produce un objeto caliente emerge de él en forma intermitente, pero no dudó de que su propagación a través del espacio fuese continua en forma de ondas electromagnéticas. Einstein propuso que la luz no solamente se emitía en forma de cuantos, sino que también se propagaba como cuantos individuales. De acuerdo con esta hipótesis, el efecto fotoeléctrico se puede explicar fácilmente. La fórmula empírica de la Ec. 2.1 se puede escribir como

2.3 $$h\nu = T_{\text{máx}} + h\nu_0$$ Efecto fotoeléctrico

La proposición de Einstein supone que los tres miembros de la Ec. 2.3 se deben interpretar de la siguiente manera:

$h\nu$ = contenido energético de cada cuanto de luz incidente
$T_{\text{máx}}$ = energía máxima del fotoelectrón
$h\nu_0$ = energía mínima necesaria para desalojar un electrón de la superficie metálica iluminada

Debe requerirse un mínimo de energía para que los electrones puedan escapar de la superficie metálica, pues de otro modo los electrones abandonarían la misma aun en ausencia de luz. La energía $h\nu_0$, característica de cada superficie determinada, se conoce con el nombre de *función de trabajo*. Por tanto, la Ec. 2.3 establece que

$$\text{Cuanto de energía} = \text{energía máxima del electrón} + \text{función de trabajo de la superficie}$$

Es fácil observar por qué no todos los fotoelectrones tienen la misma energía, sino que emergen con todas las energías hasta el valor de $T_{\text{máx}}$: $h\nu_0$ es el trabajo que se debe realizar para arrancar un electrón que se encuentra justamente debajo de la superficie metálica; si el electrón se encuentra a mayor profundidad en el metal, será necesario realizar un trabajo mayor.

La validez de esta interpretación del efecto fotoeléctrico la han confirmado los estudios de la *emisión termoiónica*. Desde hace mucho tiempo se sabía que la presencia de un cuerpo muy caliente aumentaba la conductividad eléctrica del aire circundante. Posteriormente, en el siglo XIX, se encontró que la causa de este fenómeno no era otra que la emisión de electrones por este tipo de cuerpos. La emisión termoiónica hace posible el funcionamiento de dispositivos como el cinescopio de televisión, en el que los filamentos metálicos o los cátodos especialmente revestidos dan lugar, a altas temperaturas, a densas corrientes de electrones. Evidentemente, los electrones emitidos obtienen su energía a partir de la agitación térmica de las partículas que constituyen al metal, y es de esperar que requieran una cierta energía mínima para poder escapar. Esta energía mínima se puede determinar para muchas superficies metálicas y casi siempre es idéntica a la función de trabajo fotoeléctrico para las mismas superficies. En la emisión fotoeléctrica, los fotones de luz proporcionan la energía necesaria para que el electrón pueda escapar, mientras que en la emisión termoiónica la fuente de energía es el calor: en los dos casos, los procesos físicos que tienen lugar cuando se libera un electrón de una superficie metálica son los mismos.

Apliquemos la Ec. 2.3 a un caso concreto. La función de trabajo del potasio es de 2.2 eV. Cuando sobre la superficie de potasio incide luz ultravioleta de 3,500 Å de longitud de onda (1 Å = 1 unidad angstrom = 10^{-10} m), ¿cuál es la energía máxima en electrón volts de los fotoelectrones? De la Ec. 2.3

$$T_{\text{máx}} = h\nu - h\nu_0$$

Puesto que $h\nu$ se expresa en electrón volts, solamente necesitaremos calcular el cuanto de energía $h\nu_0$ de luz de 3,500-Å. Esto es

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.63 \times 10^{-34}\ \text{J-s} \times 3 \times 10^{8}\ \text{m/s} \times 10^{10}\ \text{Å/m}}{3{,}500\ \text{Å}}$$

www.elsolucionario.org

$$= 5.7 \times 10^{-19}\,\text{J}$$

Para convertir esta energía, de joules a electrón volts, recordemos que

$$1\,\text{eV} = 1.6 \times 10^{-19}\,\text{J}$$

y de este modo

$$h\nu = \frac{5.7 \times 10^{-19}\,\text{J}}{1.6 \times 10^{-19}\,\text{J}}$$
$$= 3.6\,\text{eV}$$

Por tanto, la energía máxima del fotoelectrón es

$$T_{\text{máx}} = h\nu - h\nu_0$$
$$= 3.6\,\text{eV} - 2.2\,\text{eV}$$
$$= 1.4\,\text{eV}$$

La idea de que la luz se propaga como una serie de paquetes de energía (llamados fotones) está en franca oposición con la teoría ondulatoria de la luz. Sin embargo, esta última, que proporciona el único medio de explicar una gran multitud de fenómenos ópticos (en especial la difracción y la interferencia), es una de las teorías más firmemente establecidas en la física teórica. La idea de Planck de que un objeto caliente emite luz en forma de cuantos no era incompatible con la propagación de la luz como onda. Sin embargo, la sugerencia de Einstein en 1905, de que la luz atraviesa el espacio en forma de fotones, produjo incredulidad en sus contemporáneos. Según la teoría ondulatoria, las ondas luminosas se propagan a partir de una fuente, del mismo modo que en la superficie de un lago lo hace la ondulación que produce la caída de una piedra. La energía que transporta la luz en este ejemplo, se distribuye continuamente por todo el conjunto ondulatorio. Por otro lado, la teoría cuántica nos dice que la luz se propaga como concentraciones localizadas de energía, cada una lo suficientemente pequeña para que la pueda absorber un único electrón. Es curioso observar que la teoría cuántica de la luz, que habla de un fenómeno estrictamente corpuscular, implica explícitamente el concepto de la frecuencia ν, que es, estrictamente, un concepto ondulatorio.

La teoría cuántica de la luz es sorprendentemente satisfactoria para explicar el efecto fotoeléctrico. Predice correctamente que la máxima energía del fotoelectrón depende de la frecuencia de la luz incidente y no de su intensidad, contrariamente a lo que sugiere la teoría ondulatoria, y explica por qué aun la luz más débil puede conducir a la emisión inmediata de fotoelectrones, en contraposición, otra vez, con la teoría ondulatoria. Esta no puede explicar por qué existe un umbral de frecuencia tal que, cuando se emplea luz de frecuencia más baja, no se observan fotoelectrones, por muy intenso que sea el haz luminoso, lo cual se desprende lógicamente de la teoría cuántica.

¿Qué teoría vamos a tomar como cierta? Se han alterado o rechazado una gran cantidad de hipótesis físicas cuando se observa que no concuerdan con la experimentación, pero nunca hasta ahora se habían tenido que ingeniar dos

teorías totalmente distintas para explicar un fenómeno físico único. En este caso, la situación es totalmente diferente de la de la mecánica relativista y newtoniana, pues esta última se transforma en una aproximación de la primera. No hay manera de poder deducir la teoría cuántica a partir de la ondulatoria o viceversa.

En cada caso particular, la luz muestra una naturaleza ya sea ondulatoria o corpuscular, pero nunca ambas a la vez. El mismo haz luminoso que se difracta en una retícula puede ser motivo de la emisión de fotoelectrones en una superficie adecuada, pero estos procesos ocurren independientemente. Las teorías cuántica y ondulatoria de la luz se complementan mutuamente. Las ondas electromagnéticas explican lo observado al propagarse la luz, mientras que los fotones explican la observación según la cual hay transferencia de energía entre la luz y la materia. En realidad, no tenemos otra alternativa que considerar a la luz como algo que se manifiesta en ocasiones como una corriente de fotones discretos, o bien, como un tren de ondas el resto del tiempo. La "verdadera naturaleza" de la luz ya no es algo que se puede conceptuar en términos de la experiencia cotidiana y debemos considerar las dos teorías, con todas sus contradicciones, como las más aproximadas que podemos tener para una descripción de la luz.

2.3 RAYOS X

El efecto fotoeléctrico proporciona una prueba convincente de que los fotones luminosos pueden transferir energía a los electrones. ¿Es posible el proceso inverso? Es decir, ¿se puede transformar toda o parte de la energía cinética de un electrón en movimiento, en un fotón? El fenómeno inverso del efecto fotoeléctrico no solamente es posible, sino que da la casualidad de que se descubrió (aunque no se comprendió) antes de que salieran a la luz los trabajos de Planck y Einstein.

En 1895, Wilhelm Roentgen hizo la observación de que una radiación altamente penetrante de naturaleza desconocida se produce cuando electrones rápidos inciden sobre la materia. Estos *rayos X* tenían la propiedad de propagarse en línea recta, aun a través de un campo eléctrico o magnético, de atravesar fácilmente materias opacas, de hacer relucir sustancias fosforescentes y de impresionar placas fotográficas. Cuanto más rápido es el electrón inicial, más penetrantes son los rayos X que resultan, y cuanto mayor es el número de electrones, mayor es la intensidad del haz de rayos X.

No pasó mucho tiempo después de su descubrimiento cuando se empezó a suponer que los rayos X eran ondas electromagnéticas. Después de todo, la teoría electromagnética afirma que una carga eléctrica acelerada emite ondas electromagnéticas, y un electrón que se mueve rápidamente y es llevado bruscamente a la posición de reposo sufre también una aceleración. A la radiación que se produce en estas circunstancias se le da el nombre alemán de

bremsstrahlung ("radiación de frenado"). La ausencia de cualquier refracción perceptible de rayos X en los primeros trabajos pudo atribuirse al empleo de longitudes de onda muy cortas, por debajo de la zona del ultravioleta, ya que el índice de refracción de una sustancia disminuye hasta la unidad (que corresponde a la propagación en línea recta) al disminuir la longitud de onda.

La naturaleza ondulatoria de los rayos X la estableció por primera vez Barkla en 1906, quien puso de manifiesto su polarización. La determinación experimental de Barkla se presenta en la Fig. 2-5. Analizaremos este experimento clásico suponiendo que los rayos X son ondas electromagnéticas. En la parte izquierda, un haz de rayos X no polarizados que avanza en el sentido $-z$ incide sobre un pequeño bloque de carbono, que a su vez los dispersa; esto significa que los electrones en los átomos de carbono entran en vibración por lo vectores eléctricos de los rayos X y luego se vuelven a irradiar. Puesto que el vector eléctrico en una onda electromagnética es perpendicular a su dirección de propagación, el haz inicial de rayos X contiene vectores eléctricos únicamente en el plano xy. Los electrones blanco son, por tanto, inducidos a vibrar en el plano xy. Un rayo X dispersado que sigue el sentido $+x$ puede tener solamente un veçtor eléctrico en la dirección y y, como consecuencia, está polarizado en un solo plano. Para demostrar esta polarización, se coloca otro bloque de carbono en la trayectoria del rayo, como se indica a la derecha. La vibración de los electrones de este bloque se restringe a la dirección y y, por tanto, vuelven a radiar rayos X que se propagan exclusivamente en el plano xz y de ninguna manera en la dirección y. La

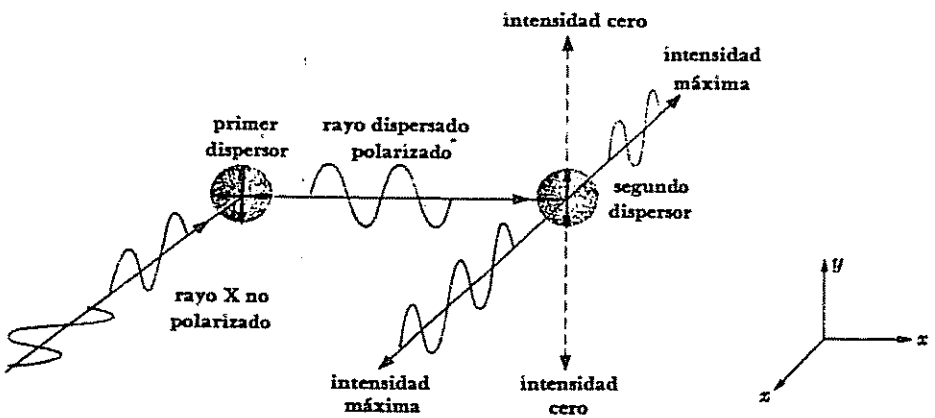


FIGURA 2-5 Experimento de Barkla para demostrar la polarización de los rayos X.

observación de la ausencia de rayos X dispersados fuera del plano xz confirma el carácter ondulatorio de los rayos X.

En 1912 se ideó un método para medir la longitud de onda de los rayos X. Se pensó que un experimento de difracción sería la solución ideal, pero, como estudia la óptica física, la distancia entre las líneas de una retícula de difracción debe ser del mismo orden de magnitud que la longitud de onda de la luz para poder obtener resultados satisfactorios, y no se pueden trazar retículas en el espacio diminuto que requieren los rayos X. No obstante, en 1912, Max von Laue advirtió que las hipotéticas longitudes de onda de los rayos X eran aproximadamente del mismo orden de magnitud que la distancia entre los átomos de una red cristalina, que es de 1 Å aproximadamente. Propuso, por tanto, que se emplearan cristales para difractar rayos X, de modo que la retícula cristalina regular hiciera las veces de una red de difracción tridimensional. Al año siguiente se realizaron los experimentos adecuados y se demostró con éxito la naturaleza ondulatoria de los rayos X. En estos experimentos se encontraron longitudes de onda entre 1.3×10^{-11} y 4.8×10^{-11} de 0.13 a 0.48 Å, que son del orden de 10^{-4} veces la longitud de onda en la luz visible y, por tanto, con cuantos 10^4 veces más energéticos. En la sección 2.4 trataremos la difracción de los rayos X.

Con fines de clasificación, las radiaciones electromagnéticas con longitudes de onda comprendidas en el intervalo de 10^{-11} a 10^{-8} m (0.1 a 100 Å) se consideran actualmente como rayos X.

La Fig. 2-6 es un diagrama de un tubo de rayos X. Un cátodo calentado por un filamento adyacente, por el que pasa una corriente eléctrica, produce una gran cantidad de electrones por emisión termoiónica. La alta diferencia de

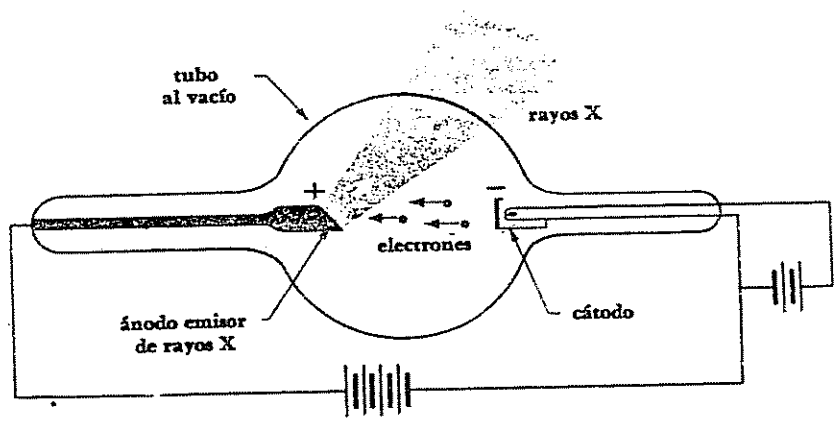


FIGURA 2-6 Tubo de rayos X.

potencial V, existente entre el cátodo y un blanco metálico o ánodo metálico acelera los electrones hacia este último. La superficie del ánodo forma un ángulo con el haz de electrones, y los rayos X que salen del ánodo atraviesan la parte lateral del tubo. El vacío que se hace en el tubo tiene por objeto permitir que los electrones lleguen al ánodo sin impedimento.

Como dijimos antes, la teoría electromagnética clásica predice la producción de bremsstrahlung cuando se aceleran los electrones; por tanto, parece que existe una justificación teórica para los rayos X emitidos en un tubo cuando el ánodo detiene los electrones rápidos. Sin embargo, la concordancia existente entre la teoría clásica y los datos experimentales no es satisfactoria en algunos aspectos importantes. Las Figs. 2-7 y 2-8 muestran el espectro de rayos X que resulta cuando se bombardean ánodos de tungsteno y molibdeno con electrones a diferentes potenciales de aceleración. Las curvas muestran dos aspectos característicos que no se pueden explicar en términos de la teoría electromagnética:

1. En el caso del molibdeno se presentan picos de intensidad pronunciada a ciertas longitudes de onda, indicando un incremento en la producción de rayos X. Estos picos se presentan a longitudes de onda muy precisas para cada material del ánodo, y dan lugar a un reajuste de las estructuras electrónicas de los átomos del ánodo, después de haber sido alteradas por el bombardeo de electrones. En este caso, la consideración importante es la producción de rayos X con longitudes de onda específicas, un efecto decididamente no clásico, además de la producción de un espectro continuo de rayos X.

2. Los rayos X producidos para un potencial de aceleración dado, V, varían en longitud de onda, pero ninguno tiene una longitud de onda inferior a un determinado valor λ_{min}. Al aumentar V disminuye λ_{min}. Para un valor determinado de V, λ_{max} es el *mismo* para los ánodos de tungsteno y molibdeno. Duane y Hunt encontraron que λ_{min} es inversamente proporcional a V; su relación exacta es

$$\lambda_{min} = \frac{1.24 \times 10^{-6}\ \text{V-m}}{V} \qquad (2.4)$$

Emisión de rayos X

La segunda observación se comprende fácilmente teniendo en cuenta la teoría cuántica de la radiación. La mayor parte de los electrones que inciden sobre el ánodo pierden gradualmente su energía cinética en numerosos choques; sus energías se transforman en calor. (Este es el motivo por el que los ánodos en los tubos de rayos X son normalmente metales que tienen puntos de fusión muy elevados, y por el que normalmente se emplean eficaces sistemas de refrigeración.) Algunos de los electrones pierden toda o la mayor parte de su energía en un solo choque con los átomos del ánodo: ésta es la energía que es devuelta en forma de rayos X. La producción de rayos X es, por consiguiente, el fenómeno inverso del efecto fotoeléctrico, con excepción de los picos de intensidad señalados en la observación 1 anterior. En lugar de que la energía del fotón se transforme en energía cinética del electrón, ésta se transforma en energía de fotón. Una longitud de onda corta significa una frecuencia alta, y una alta

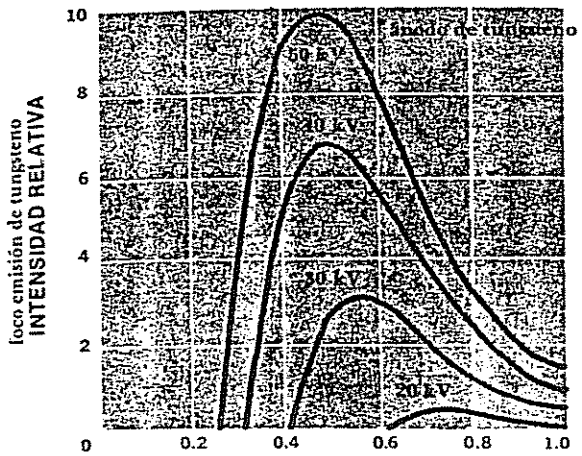


FIGURA 2-7 Espectros de rayos X del tungsteno para distintos valores de potencial de aceleración.

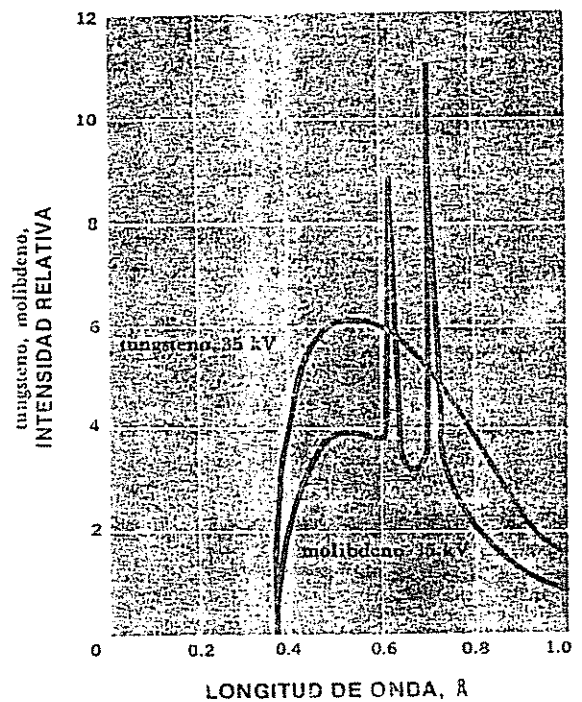


FIGURA 2-8 Espectro de rayos X del tungsteno y del molibdeno para 35 kV de aceleración.

www.elsolucionario.org

frecuencia significa una alta energía del fotón $h\nu$. Es, por tanto, lógico interpretar el límite inferior λ_{min} de longitud de onda de la Ec. 2.4 como el correspondiente a una energía máxima del fotón $h\nu_{máx}$, donde

$$h\nu_{máx} = \frac{hc}{\lambda_{min}} \tag{2.5}$$

Como las funciones de trabajo son solamente de unos cuantos electrón volts, mientras que los potenciales aceleradores en los tubos de rayos X son del orden de decenas o cientos de miles de volts, podemos considerar que la energía cinética T de los electrones de bombardeo es

$$T = eV \tag{2.6}$$

Cuando toda la energía cinética de un electrón se pierde para crear un solo fotón, tenemos

$$h\nu_{máx} = T \tag{2.7}$$

Sustituyendo las Ec. 2.5 y 2.6 en 2.7, resulta

$$h\nu_{máx} = T$$

$$\frac{hc}{\lambda_{min}} = eV$$

$$\lambda_{min} = \frac{hc}{eV}$$

$$= \frac{6.63 \times 10^{-34}\ \text{J-s} \times 3 \times 10^{8}\ \text{m/s}}{1.6 \times 10^{-19}\ \text{C} \times V}$$

$$= \frac{1.24 \times 10^{-6}}{V}\ \text{V-m}$$

que es exáctamente la relación experimental de la Ec. 2.4. Es, por tanto, correcto considerar la emisión de rayos X como el fenómeno inverso del efecto fotoeléctrico.

Un aparato normal de rayos X puede tener un potencial acelerador de 50,000 V. Para hallar la longitud de onda más corta presente en su radiación utilizamos la Ec. 2.4, y vemos que

$$\lambda_{min} = \frac{1.24 \times 10^{-6}\ \text{V-m}}{5 \times 10^{4}\ \text{V}}$$

$$= 2.5 \times 10^{-11}\ \text{m}$$

$$= 0.25\ \text{Å}$$

Esta longitud de onda corresponde a la frecuencia

$$\nu_{máx} = \frac{c}{\lambda_{min}}$$

$$= \frac{3 \times 10^{8}\ \text{m/s}}{2.5 \times 10^{-11}\ \text{m}}$$

$$= 1.2 \times 10^{19}\ \text{Hz}$$

2.4 DIFRACCION DE RAYOS X

Volvamos ahora al problema de cómo comprobar que los rayos X son ondas electromagnéticas. Un cristal está formado por una distribución regular de átomos, cada uno de los cuales es capaz de dispersar cualquier onda electromagnética que incida sobre él. La dispersión ocurre en forma directa. Un átomo en un campo eléctrico constante se polariza, ya que sus electrones cargados negativamente y sus núcleos con carga positiva experimentan fuerzas en sentidos opuestos. Estas fuerzas son pequeñas, comparadas con las que mantienen unido al átomo y en consecuencia, el resultado es una distribución de carga irregular equivalente a un dipolo eléctrico. En presencia del campo eléctrico alterno de una onda electromagnética de frecuencia ν, la polarización cambia de signo con la misma frecuencia ν. Se crea de esta manera un dipolo eléctrico oscilante a expensas de parte de la energía de la onda incidente, cuya amplitud, por tanto, disminuye. El dipolo oscilador a su vez irradia ondas electromagnéticas de frecuencia ν, y estas ondas secundarias se propagan en todas las direcciones, excepto a lo largo del eje del dipolo. En un conjunto de átomos expuestos a radiación no polarizada, la radiación secundaria es isotrópica debido a que las contribuciones de los átomos individuales son al azar. En terminología ondulatoria, las ondas secundarias tienen frentes de onda esféricos en lugar de frentes de onda planos como las ondas incidentes (Fig. 2-9). El proceso de dispersión, por tanto, consiste en que un átomo absorbe ondas incidentes planas y emite ondas esféricas de la misma frecuencia.

Un haz monocromático de rayos X que llegue a un cristal se dispersará en todas las direcciones dentro de él, pero, debido a la distribución regular de los átomos, en ciertas direcciones las ondas dispersadas interferirán constructivamente, mientras que en otras interferirán destructivamente. Se puede considerar que los átomos de un cristal pertenecen a grupos que definen familias de planos paralelos, Fig. 2-10, teniendo cada grupo una separación característica entre los planos que lo componen. Esta idea fue sugerida por W. L. Bragg en 1913 y, en honor suyo, se conocen estos planos como *planos de Bragg*. Las condiciones que debe cumplir la radiación que dispersan los átomos de un cristal para que haya interferencia constructiva se pueden obtener a partir de un diagrama como el de la Fig. 2-11. Un haz de rayos X de longitud de onda λ incide formando un ángulo θ con la superficie de un cristal que contiene una familia de planos de Bragg separados entre sí por una distancia d. El haz llega al átomo A en el primer plano y al átomo B en el siguiente. Cada uno de ellos

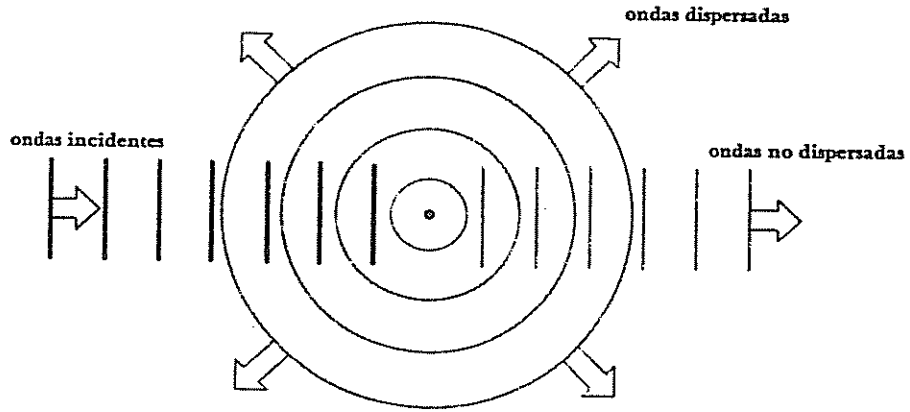


FIGURA 2-9 Dispersión de la radiación electromagnética por un grupo de átomos. Las ondas planas incidentes se vuelven a radiar como ondas esféricas.

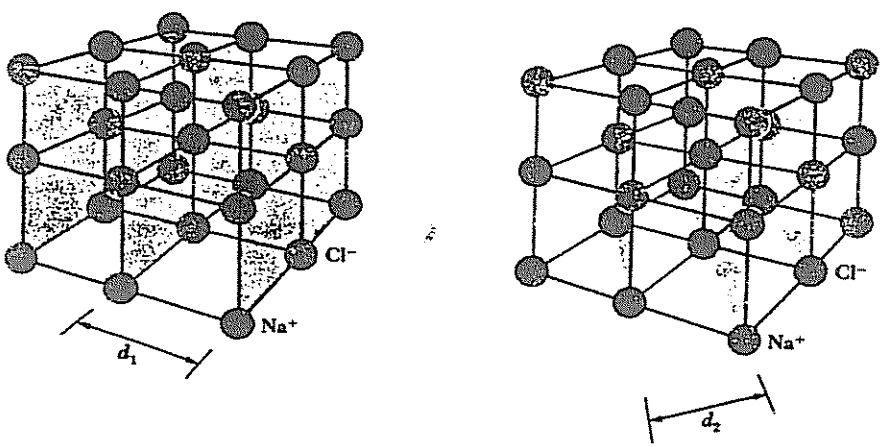


FIGURA 2-10 Dos conjuntos de planos de Bragg en un cristal de NaCl.

dispersa parte del haz en todas las direcciones del espacio. La interferencia constructiva tendrá lugar solamente entre aquellos rayos dispersos que sean paralelos y cuyos recorridos difieran exactamente en λ, 2λ, 3λ, etc. La diferencia de recorrido debe ser $n\lambda$, siendo n un número entero. Los únicos rayos dispersados por A y B en los que se cumple esto son los marcados por I y II en

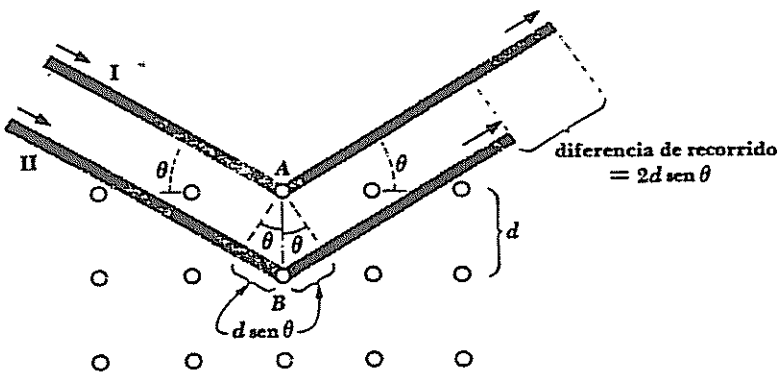


FIGURA 2-11 Dispersión de rayos X por un cristal cúbico.

la Fig. 2-11. La primera condición en I y II es que el ángulo común de dispersión sea igual al ángulo de incidencia θ del haz original. La segunda condición es que

$$2d \operatorname{sen} \theta = n\lambda \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{2.8}$$

ya que el rayo II debe recorrer la distancia $2d$ sen θ más que el rayo I. El número n es el *orden* del haz dispersado.

El diseño esquemático de un espectrómetro de rayos X, basado en el análisis de Bragg, aparece en la Fig. 2-12. Un haz colimado de rayos X incide sobre un cristal bajo un ángulo θ y se coloca un detector, de modo que registre los rayos cuyo ángulo de dispersión sea también θ. Cualquier rayo X que llegue al detector obedecerá a la primera condición de Bragg. Si varía θ, el detector registrará los picos de intensidad correspondientes a los órdenes predichos por la Ec. 2.8. Si se conoce el espaciamiento d entre planos de Bragg adyacentes en el cristal, la longitud de onda λ de los rayos X se puede calcular.

¿Cómo podemos determinar el valor de d? Es un problema muy sencillo en el caso de cristales cuyos átomos están distribuidos en redes cúbicas como las de la sal común (NaCl) (Fig. 2-10). A modo de ejemplo, vamos a calcular la separación entre átomos adyacentes en un cristal de NaCl. El peso molecular del NaCl es 58.5, lo cual significa que hay 58.5 kg de NaCl en 1 kilomol (kmol). Puesto que hay $N_0 = 6.02 \times 10^{26}$ moléculas en 1 kmol de cualquier sustancia (N_0 es el número de Avogadro), la masa de cada "molécula" de NaCl, es decir, de cada par de átomos Na + Cl, está dada por

$$m_{\text{NaCl}} = 58.5 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \times \frac{1}{6.02 \times 10^{26} \text{ moléculas/Kmol}}$$
$$= 9.72 \times 10^{-26} \text{ kg/molécula}$$

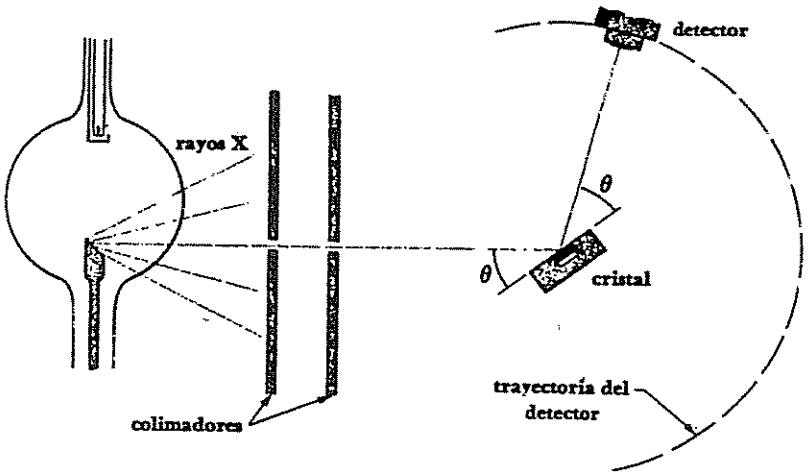


FIGURA 2-12 Espectrómetro de rayos X.

El NaCl cristalino tiene una densidad de $2.16 \times 10^3\ \text{kg/m}^3$, y así, teniendo en cuenta que hay dos átomos en cada "molécula" de NaCl, el número de átomos en $1\ \text{m}^3$ de NaCl es

$$n = 2\ \frac{\text{átomos}}{\text{molécula}} \times 2.16 \times 10^3\ \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \times \frac{1}{9.72 \times 10^{-26}\ \text{kg/molécula}}$$
$$= 4.45 \times 10^{28}\ \text{átomos/m}^3$$

Si d es la distancia entre átomos adyacentes en un cristal, hay d^{-1} átomos/m en cualquiera de los tres ejes del cristal y d^{-3} átomos/m^3 en todo el cristal. De aquí

$$d^{-3} = n$$

y

$$d = n^{-3} = (4.45 \times 10^{28})^{-3}\ \text{m}$$
$$= 2.82 \times 10^{-10}\ \text{m}$$
$$= 2.82\ \text{Å}$$

2.5 EFECTO COMPTON

La teoría cuántica de la luz afirma que los fotones se comportan como partículas, excepto en lo que respecta a la ausencia de masa en reposo. Si esto es verdadero, nos será posible estudiar choques entre fotones y electrones por ejemplo, del mismo modo como son tratados en mecánica elemental los choques entre bolas de billar.

La Fig. 2-13 muestra cómo se puede representar un choque entre un fotón de rayos X y un electrón (que se considera inicialmente en reposo en el sistema de coordenadas del laboratorio). El fotón se dispersa fuera de su dirección original, mientras que el electrón adquiere un momentum y se pone en movimiento. Se puede considerar que en el choque el fotón pierde una

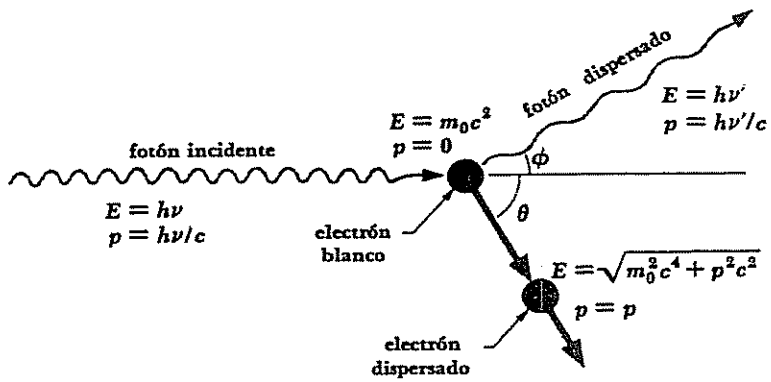


FIGURA 2-13 El efecto Compton.

cantidad de energía igual a la que gana el electrón en forma de energía cinética T, aunque, de hecho, se trate de fotones individuales. Si al fotón inicial se le asocia una frecuencia ν, el fotón que se dispersa tiene la frecuencia ν' más baja, donde

Pérdida de energía del fotón = ganancia de energía del electrón

$$h\nu - h\nu' = T \tag{2.9}$$

Recordemos que en el capítulo anterior

$$E = \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2}$$

por tanto, como el fotón no tiene masa en reposo, su energía total es

$$E = pc$$

ya que

$$E = h\nu$$

para un fotón, su momentum es

$$p = \frac{E}{c}$$
$$= \frac{h\nu}{c} \tag{2.10}$$

www.elsolucionario.org

El momentum, a diferencia de la energía, es una cantidad vectorial con dirección, sentido y magnitud. En el choque se debe conservar el momentum en cada una de las dos direcciones perpendiculares entre sí. (Cuando en un choque participan más de dos cuerpos, se conserva el momentum en cada una de las tres direcciones perpendiculares mutuas.) Las direcciones que nosotros elegimos aquí son la original del fotón y la perpendicular a ella en el plano que contiene al electrón y al fotón dispersado (Fig. 2-13). El momentum inicial del fotón es $h\nu/c$; el del fotón dispersado es $h\nu'/c$ y los momenta inicial y final del electrón son 0 y p, respectivamente. En la dirección original del fotón

Momentum inicial = momentum final

$$\frac{h\nu}{c} + 0 = \frac{h\nu'}{c}\cos\phi + p\cos\theta \tag{2.11}$$

y perpendicular a esta dirección

Momentum inicial = momentum final

$$0 = \frac{h\nu'}{c}\operatorname{sen}\phi - p\operatorname{sen}\theta \tag{2.12}$$

El ángulo ϕ está formado por las direcciones del fotón inicial y del dispersado, y θ está formado por la dirección del fotón original y la del electrón de retroceso. A partir de las Ecs. 2.9, 2.11 y 2.12 se obtiene una fórmula que relaciona la diferencia de longitud de onda entre el fotón inicial y el dispersado con el ángulo ϕ, que está formado por sus respectivas direcciones, magnitudes ambas que se pueden medir fácilmente.

El primer paso es multiplicar las Ecs. 2.11 y 2.12 por c y volverlas a escribir como

$$pc\cos\theta = h\nu - h\nu'\cos\phi$$
$$pc\operatorname{sen}\theta = h\nu'\operatorname{sen}\phi$$

Elevando al cuadrado estas ecuaciones y sumando, se elimina θ y queda

$$p^2c^2 = (h\nu)^2 - 2(h\nu)(h\nu')\cos\phi + (h\nu')^2 \tag{2.13}$$

Igualando las dos expresiones de la energía total de una partícula

$$E = T + m_0c^2$$
$$E = \sqrt{m_0{}^2c^4 + p^2c^2}$$

del capítulo anterior tenemos

$$(T + m_0c^2)^2 = m_0{}^2c^4 + p^2c^2$$
$$p^2c^2 = T^2 + 2m_0c^2T$$

Como

$$T = h\nu - h\nu'$$

obtenemos

$$p^2c^2 = (h\nu)^2 - 2(h\nu)(h\nu') + (h\nu')^2 + 2m_0c^2(h\nu - h\nu') \tag{2.14}$$

Sustituyendo este valor de p^2c^2 en la Ec. 2.13, obtenemos finalmente

$$2m_0c^2(h\nu - h\nu') = 2(h\nu)(h\nu')(1 - \cos\phi) \tag{2.15}$$

Es más sencillo expresar esta relación en función de la longitud de onda en lugar de la frecuencia. Dividiendo la Ec. 2.15 entre $2h^2c^2$,

$$\frac{m_0c}{h}\left(\frac{\nu}{c} - \frac{\nu'}{c}\right) = \frac{\nu}{c}\frac{\nu'}{c}(1 - \cos\phi)$$

y así, puesto que $\nu/c = 1/\lambda$ y $\nu'/c = 1/\lambda'$,

$$\frac{m_0c}{h}\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) = \frac{(1 - \cos\phi)}{\lambda\lambda'}$$

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0c}(1 - \cos\phi) \tag{2.16}$$

Efecto Compton

Esta última ecuación la dedujo Arthur H. Compton a principios de la década de 1920, y en su honor el fenómeno que dicha ecuación describe se conoce como *efecto Compton*. Constituye una seria prueba a favor de la teoría cuántica de la radiación.

La Ec. 2.16 proporciona la variación de longitud de onda que se espera experimente un fotón al ser dispersado a un ángulo ϕ por una partícula de masa en reposo m_0; el proceso es independiente de la longitud de onda del fotón incidente. A la expresión h/m_0c se le conoce como *longitud de onda Compton* de la partícula dispersada que, para el caso de un electrón, es 0.024 Å (2.4×10^{-12} m). A partir de la Ec. 2.16 observamos que el cambio máximo de longitud de onda que puede ocurrir tendrá lugar para $\phi = 180°$, cuando la variación de longitud de onda sea el doble de la longitud de onda Compton h/m_0c. Puesto que la longitud de onda Compton de un electrón es 0.024 Å, mientras que para otras partículas es considerablemente menor debido a su mayor masa en reposo, el cambio máximo de longitud de onda en el efecto Compton es de 0.048 Å. Cambios de este orden o más pequeños se observan fácilmente sólo con rayos X, ya que el cambio en longitud de onda en la luz visible es menor que el 0.01% de la longitud de onda inicial, mientras que para los rayos X de $\lambda = 1$ Å es de un porcentaje mayor.

La demostración experimental del efecto Compton es inmediata. Como se ve en la Fig. 2.14, un haz de rayos X, de longitud de onda conocida, se dirige hacia un blanco y las longitudes de onda de los rayos X dispersados se determinan para varios ángulos θ. Los resultados, Fig. 2.15, muestran los cambios de longitud de onda predichos por la Ec. 2.16, pero, para cada ángulo, los rayos X dispersados incluyen también cierta proporción de ellos que tienen la longitud de onda inicial. Esto no es difícil de comprender. Al deducir la Ec. 2.16 supusimos que la partícula dispersada tenía libertad de movimiento. Esta

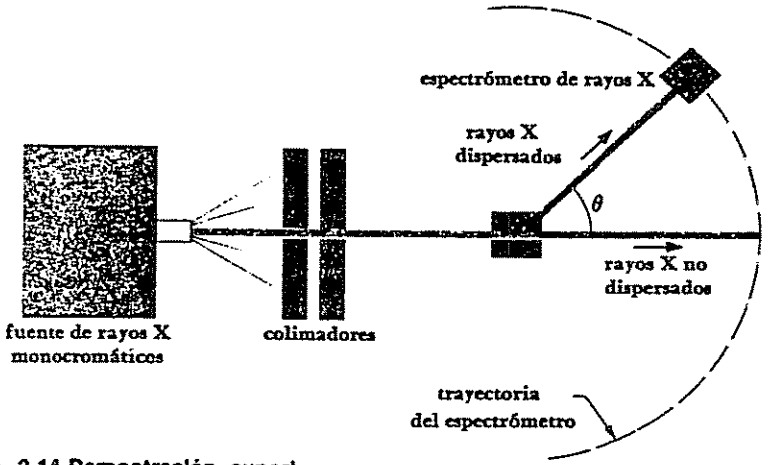


FIGURA 2-14 Demostración experimental del efecto Compton.

suposición es razonable ya que muchos electrones están unidos a sus átomos de una manera muy débil. Sin embargo, otros están muy firmemente unidos y, cuando son golpeados por un fotón, es todo el átomo en conjunto el que experimenta retroceso. En este caso, el valor de m_0 de la Ec. 2.16 es el correspondiente al átomo entero. Normalmente es del orden de decenas de miles de veces mayor que el del electrón, resultando una variación Compton tan pequeña como para no ser detectable.

2.6 PRODUCCION DE PARES

Como hemos visto, un fotón puede ceder toda o parte de su energía $h\nu$ a un electrón. También es posible que un fotón se materialice en un electrón y un positrón (electrón positivo), proceso en el que la energía electromagnética se transforma en energía en reposo. Los principios de conservación no se violan cuando un par electrón-positrón se crea cerca de un núcleo atómico (Fig. 2-16). La suma de las cargas del electrón ($q=-e$) y del positrón ($q=+e$) es cero, como la carga del fotón; la energía total, incluyendo la energía de masa, del electrón y del positrón es igual a la energía del fotón; el momentum lineal se conserva gracias al núcleo que lleva suficiente momentum del fotón como para que ocurra el proceso, pero, debido a su masa relativamente enorme, únicamente se lleva una fracción despreciable de la energía del fotón. (Para que ocurra producción de pares en el espacio vacío no se pueden conservar la energía ni el momentum lineal, por tanto, ahí no se produce.)

La energía en reposo m_0c^2 de un electrón o de un positrón es 0.51 MeV y, por tanto, la producción de pares requiere una energía del fotón de por lo menos

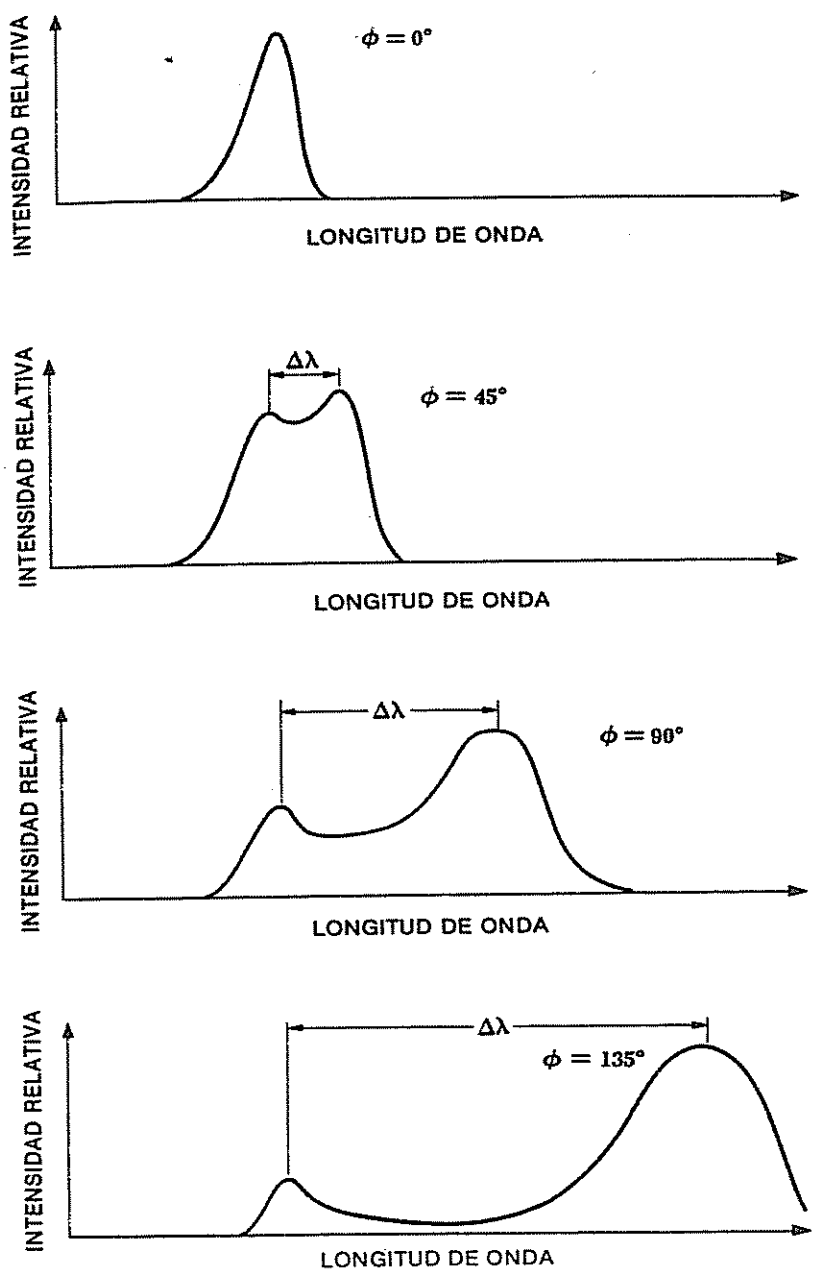


FIGURA 2-15 Dispersión Compton.

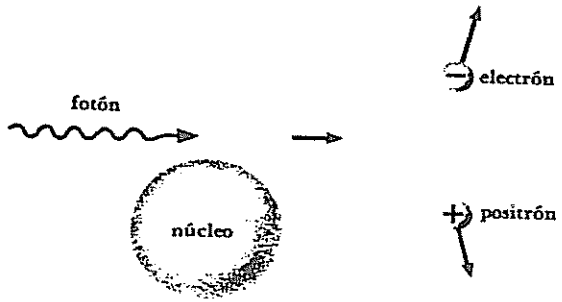


FIGURA 2-16 Producción de pares.

1.02 MeV. Cualquier energía adicional del fotón se transforma en energía cinética del electrón y del positrón. La longitud de onda máxima del fotón correspondiente es 0.012 Å. Las ondas electromagnéticas que tienen esas longitudes de onda reciben el nombre de *rayos gamma*, y se encuentran en la naturaleza como una de las emisiones de núcleos radiactivos y también en los rayos cósmicos.

El proceso inverso al de la producción de pares se presenta cuando un electrón y un positrón se unen y se anulan para crear un par de fotones. Las direcciones de los fotones son de tal manera que se conservan tanto la energía como el momentum lineal y; por tanto, no se requiere núcleo u otra partícula para que la anulación tenga lugar.

Por tanto, tres procesos en total son responsables de la absorción de rayos X y gamma en la materia. A bajas energías de fotón, la dispersión Compton es el único mecanismo, ya que existen umbrales definidos tanto para el efecto fotoeléctrico (varios eV) como para la producción de pares de electrones (1.02 MeV). Tanto la dispersión Compton como el efecto fotoeléctrico disminuyen en importancia con el aumento de energía, como se muestra en la Fig. 2-17 para el caso de un absorbedor de plomo, mientras que la probabilidad de producción de pares aumenta. A elevadas energías de fotón, el mecanismo predominante de pérdida de energía es la producción de pares. La curva representativa de la absorción total en el plomo tiene su mínimo en aproximadamente 2 MeV. La ordenada de la gráfica es el coeficiente de absorción lineal μ, que es igual a la relación entre la disminución fraccionaria de la intensidad de la radiación $-dI/I$ y el espesor del absorbedor dx. Es decir,

$$\frac{dI}{I} = -\mu\, dx$$

cuya solución es

$$I = I_0 e^{-\mu x}$$

La intensidad de la radiación disminuye exponencialmente con el espesor del absorbente.

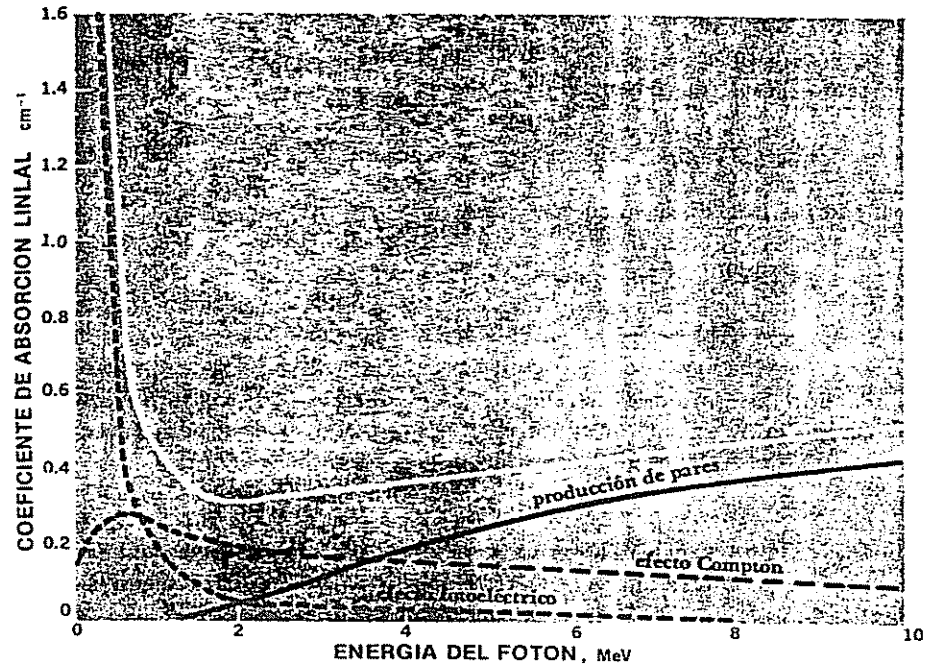


FIGURA 2-17. Coeficientes de absorción lineal para fotones en el plomo. Estas curvas se refieren a la energía de absorción, no a la probabilidad de interacciones en el medio.

2.7 CORRIMIENTO GRAVITACIONAL HACIA EL ROJO

Aunque un fotón no tiene masa en reposo, se comporta como si tuviera masa inercial

2.17 $$m = \frac{h\nu}{c^2}$$ "Masa" del fotón

¿Tiene también el fotón masa gravitacional? Como se ha encontrado experimentalmente que las masas inercial y gravitacional de todos los cuerpos materiales son iguales (este *principio de equivalencia* es uno de los puntos de partida de la teoría general de la relatividad, de Einstein) vale la pena preguntarse si los fotones tienen el mismo comportamiento gravitacional que otras partículas.

Consideremos a un fotón de frecuencia ν emitido desde la superficie de una estrella de masa M y radio R (Fig. 2-18). La energía potencial de una masa m sobre la superficie de la estrella es

www.elsolucionario.org

2.18 $$V = -\frac{GMm}{R}$$

Por tanto, la energía potencial del fotón es

$$V = -\frac{GMh\nu}{c^2R}$$

y su energía total E, la suma de V y el cuanto de energía $h\nu$ es

$$E = h\nu - \frac{GMh\nu}{c^2R}$$

2.19 $$= h\nu\left(1 - \frac{GM}{c^2R}\right)$$

A una gran distancia de la estrella, por ejemplo en la Tierra, el fotón está fuera del campo gravitacional de la estrella, pero su energía total permanece igual. La energía del fotón es ahora completamente electromagnética, y

2.20 $$E = h\nu'$$

donde ν' es la frecuencia del fotón a su llegada. (La energía potencial del fotón en el campo gravitacional de la Tierra es despreciable, comparada con la misma en el campo gravitacional de la estrella.) Por tanto,

$$h\nu' = h\nu\left(1 - \frac{GM}{c^2R}\right)$$

$$\frac{\nu'}{\nu} = 1 - \frac{GM}{c^2R}$$

2.21 $$\frac{\Delta\nu}{\nu} = \frac{\nu - \nu'}{\nu} = 1 - \frac{\nu'}{\nu} = \frac{GM}{c^2R}$$

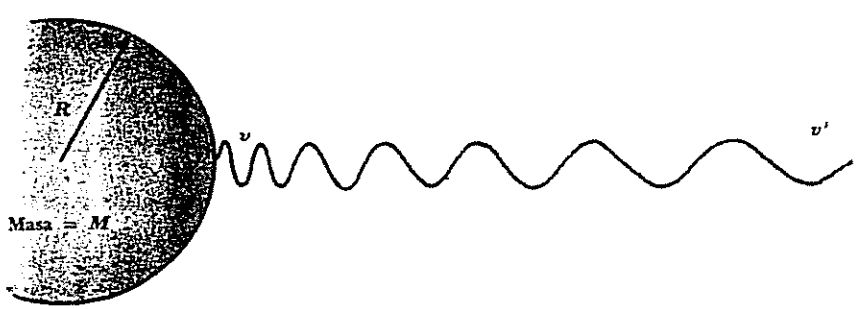


FIGURA 2-18 La frecuencia de un fotón emitido por la superficie de una estrella disminuye a medida que este se aleja de la estrella.

El fotón tiene una frecuencia *más baja* en la Tierra, correspondiente a su pérdida de energía a medida que abandona el campo de la estrella. Así, en el espectro visible, su longitud estará desplazada hacia el extremo rojo, y el fenómeno se conoce como *corrimiento gravitacional hacia el rojo*. Hay que distinguirlo del desplazamiento doppler hacia el rojo, que se presenta en los espectros de galaxias distantes debido a su aparente recesión desde la Tierra, una recesión que se atribuye a la expansión general del universo.

Como estudiaremos en el capítulo 4, los átomos de cualquier elemento, cuando son excitados adecuadamente, emiten fotones sólo de ciertas frecuencias específicas. La validez de la Ec. 2.21 se puede, por tanto, comprobar comparando las frecuencias encontradas en los espectros estelares con los espectros obtenidos en el laboratorio. Como G/c^2 es solamente

$$\frac{G}{c^2} = \frac{6.67 \times 10^{-11}\ \text{N-m}^2/\text{kg}^2}{(3 \times 10^8\ \text{m/s})^2} = 7.41 \times 10^{-28}\ \text{m/kg}$$

el corrimiento gravitacional hacia el rojo solamente se puede observar en radiaciones procedentes de estrellas muy densas. En el caso del Sol, una estrella más o menos común, $R = 6.96 \times 10^8$ m y $M = 1.99 \times 10^{30}$ kg, y

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} = \frac{GM}{c^2R} = 7.41 \times 10^{-28}\ \frac{\text{m}}{\text{kg}} \times \frac{1.99 \times 10^{30}\ \text{kg}}{6.96 \times 10^8\ \text{m}}$$

$$= 2.12 \times 10^{-6}$$

Como $\Delta\lambda/\lambda = \Delta\nu/\nu$, el corrimiento gravitacional hacia el rojo en la radiación solar asciende a sólo 0.01 Å, aproximadamente, para luz verde de longitud de onda 5,000 Å y no se puede detectar debido al ensanchamiento doppler de las líneas espectrales.

Sin embargo, existe una clase de estrellas en etapas finales de su evolución denominadas *enanas blancas* que están compuestas de átomos cuyas estructuras electrónicas se han "colapsado" y estas estrellas tienen densidades enormes—comúnmente $\sim$0.3 ton/cm^3. Una enana blanca podría tener un radio de 9×10^6 m, aproximadamente 0.01 la del Sol, y una masa de 1.2×10^{30} kg, aproximadamente 0.6 la del Sol, tal que

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} = \frac{GM}{c^2R} \approx 7.41 \times 10^{-28}\ \frac{\text{m}}{\text{kg}} \times \frac{1.2 \times 10^{30}\ \text{kg}}{9 \times 10^6\ \text{m}}$$

$$\approx 10^{-4}$$

Aquí el corrimiento gravitacional hacia el rojo será $\approx$0.5 Å para luz de longitud de onda de 5,000 Å, que es mensurable bajo circunstancias favorables. En el caso de la estrella enana blanca Sirio B (el "compañero de Sirio"), el corrimiento hacia el rojo previsto es $\Delta\nu/\nu \simeq 5.9 \times 10^{-5}$ y el corrimiento observado

es 6.6×10^{-5}; en vista de lo dudoso de la relación M/R para Sirio B, estas cifras confirmarían la atribución de masa gravitacional a los fotones.

Si existiera una estrella para la que $GM/c^2R \geq 1$, vemos, según la Ec. 2.19 que ningún fotón saldría nunca de ella. Una estrella de este tipo no irradiaría y sería invisible —un "agujero negro" en el espacio. Parece no haber razones fundadas para que no existan en realidad agujeros negros, y sería posible detectarlos en virtud de la combinación de su capacidad para absorber luz y sus efectos de gravitación sobre objetos astronómicos cercanos a ellos. Como dato curioso, el universo conocido puede ser en sí un agujero negro: se cree que la masa y el radio del universo son aproximadamente 10^{53} kg y 10^{26} m respectivamente y, como $G/c^2 \approx 10^{-27}$ m/kg, $(GM/c^2R)_{\text{universo}} \approx 1$.

Recientemente se ha detectado un corrimiento gravitacional de la frecuencia en un experimento de laboratorio midiendo el cambio de frecuencia de rayos gamma después de "caer" de una altura h sobre la superficie terrestre. Un cuerpo de masa m que cae de una altura h gana mgh en energía. Si se considera que un fotón que cae (su frecuencia original es ν) tiene una masa constante $h\nu/c^2$ (la variación de frecuencia es tan pequeña que se puede ignorar el cambio de masa), su energía final $h\nu'$ está dada por

$$h\nu' = h\nu + mgh = h\nu + \frac{h\nu gh}{c^2}$$

$$= h\nu\left(1 + \frac{gh}{c^2}\right) \tag{2.22}$$

Para $h = 20$ m,

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} = \frac{gh}{c^2} = \frac{9.8 \text{ m/s}^2 \times 20 \text{ m}}{(3 \times 10^8 \text{ m/s})^2}$$
$$= 2.2 \times 10^{-15}$$

Un desplazamiento de esta magnitud apenas es detectable, y el resultado confirma la Ec. 2.22.

Problemas

1. El umbral de longitud de onda para la emisión fotoeléctrica en el tungsteno es de 2,300 Å. ¿Qué longitud de onda se debe utilizar para expulsar a los electrones con una energía máxima de 1.5 eV.

2. El umbral de frecuencia para la emisión fotoeléctrica del cobre es 1.1×10^{15} Hz. Determinar la energía máxima de los fotoelectrones (en joules y electrón volts) cuando luz de frecuencia de 1.5×10^{15} Hz incide sobre una superficie de cobre.

3. La función de trabajo del sodio es 2.3 eV. ¿Cuál será la máxima longitud de onda de luz que producirá emisión de fotoelectrones del sodio? ¿Cuál será la energía cinética máxima de los fotoelectrones, si luz de 2,000 Å incide sobre una superficie de sodio?

4. Determinar la longitud de onda y la frecuencia de un fotón de 100 MeV.

5. Determinar la energía de un fotón de 7,000 Å.

6. En circunstancias favorables, el ojo humano puede detectar 10^{-18} joules de energía electromagnética. ¿Cuántos fotones de 6,000-Å representan?

7. Un trasmisor de radio de 1,000 W funciona a una frecuencia de 880 kHz. ¿Cuántos fotones emite por segundo?

8. ¿Cuántos fotones emite por segundo una lámpara amarilla de 10 W? (Considerar que la luz es monocromática con una longitud de onda de 6,000 Å.)

9. La luz del Sol llega a la Tierra a razón de aproximadamente 1,400 W/m^2 de área, perpendicular a la dirección de la luz. a) Encontrar la presión máxima que dicha luz puede ejercer sobre la superficie de la Tierra (en lb/pulg^2). b) Considerar que la luz del Sol consta exclusivamente de fotones de 6,000 Å ¿Cuántos fotones por m2 llegan a la parte de la Tierra que está exactamente en frente del Sol en cada segundo? c). El radio promedio de la órbita terrestre es de 1.5×10^{11} m. ¿Cuál es la potencia de salida del Sol en watts y cuántos fotones emite por segundo? *d*) ¿Cuántos fotones por m^3 se encuentran cerca de la Tierra ?

10. ¿Cuál es la longitud de onda de los rayos X emitidos cuando electrones de 100 keV golpean un blanco? ¿Cuál es su frecuencia?

11. Un aparato produce rayos X de 0.1 Å. ¿Qué voltaje acelerador emplea?

12. La distancia entre planos atómicos adyacentes en la calcita es 3×10^{-8}cm. ¿Cuál es el ángulo más pequeño entre estos planos y un haz incidente de rayos X de 0.3 Å bajo el que se pueden detectar estos rayos X?

13. Un cristal de cloruro potásico tiene una densidad de 1.98×10^3 kg/m^3. El peso molecular del KCl es 74.55. Calcular la distancia entre átomos adyacentes.

14. ¿Cuánta energía debe tener un fotón para tener el momentum de un protón de 10 MeV?

15. ¿Cuál es la frecuencia de un fotón de rayos X cuyo momentum es 1.1×10^{-23} kg-m/s?

16. Demostrar que es imposible que un fotón ceda toda su energía y momentum a un electrón libre, de modo que el efecto fotoeléctrico pueda tener lugar solamente cuando los fotones golpeen electrones ligados.

17. Un haz de rayos X es dispersado por electrones libres. A 45° de la dirección del haz, los rayos X dispersados tienen una longitud de onda de 0.022 Å. ¿Cuál es la longitud de onda de los rayos X en el haz original?

18. Un fotón de rayos X cuya frecuencia inicial era de 1.5×10^{19} Hz emerge de una colisión con un electrón, con una frecuencia de 1.2×10^{19} Hz ¿Cuánta energía cinética le trasmitieron al electrón?

19. Un fotón de rayos X de frecuencia inicial 3×10^{19} Hz choca con un electrón y es dispersado a 90°. Determinar su nueva frecuencia.

20. Determinar la energía de un fotón de rayos X que puede ceder una energía máxima de 50 keV a un electrón.

21. Un haz monocromático de rayos X, cuya longitud de onda es 0.558 Å, se dispersa a 46°. Hallar la longitud de onda del haz dispersado.

22. En la Sec. 2.4 se consideró que los rayos X dispersados por un cristal no sufrían cambio en su longitud de onda. Demostrar que esta idea es razonable calculando la longitud de onda de Compton de un átomo de Na y comparándola con la longitud de onda normal de rayos X de 1 Å.

23. Tal como se analiza en el Cap. 12, ciertos núcleos atómicos emiten fotones cuando sufren transiciones de estados de energía "excitados" a sus estados "base" o normales. Estos fotones constituyen los rayos gamma. Cuando un núcleo emite un fotón, retrocede en la dirección opuesta. *a*) El núcleo del $^{57}_{27}$Co decae por captura *K* al $^{57}_{26}$Fe, que emite un fotón perdiendo 14.4 keV para alcanzar su estado base. La masa de un átomo de $^{57}_{26}$Fe es 9.5×10^{-26} kg. ¿En cuánto se reduce la energía del fotón de la cantidad total disponible de 14.4 keV como resultado de tener que compartir energía con el átomo de retroceso? *b*) En algunos cristales, los átomos están tan íntimamente unidos que el cristal completo retrocede cuando se emite un fotón de rayos gamma, en vez de un átomo individual. Este fenómeno se conoce con el nombre de *efecto Mössbawer*. ¿En cuánto se reduce la energía del fotón en este caso, si el núcleo excitado de $^{57}_{26}$Fe es parte de cristal de 1g? **c*) La emisión de rayos gamma esencialmente libre de retroceso en situaciones como las de *b*) significa que es posible construir una fuente de fotones esencialmente monoenergéticos y, por tanto, monocromáticos. Una fuente de este tipo se utilizó en el experimento descrito en el último párrafo de la Sec. 2.7 ¿Cuál es la frecuencia original y el cambio de frecuencia de un fotón de rayos gamma de 14.4 keV cuando, en su caída, se encuentran a 20 m de la superficie de la Tierra?

24. Un positrón choca de frente contra un electrón y ambos se anulan. Cada partícula tenía una energía cinética de 1 MeV. Encuentre la longitud de onda de los fotones resultantes.

www.elsolucionario.org

3 PROPIEDADES ONDULATORIAS DE LAS PARTICULAS

Retrospectivamente, puede parecer extraño que transcurrieran dos décadas entre el descubrimiento de las propiedades corpusculares de las ondas en 1905, y la hipótesis de que las partículas podían comportarse como ondas, en 1924. Sin embargo, una cosa es sugerir una hipótesis revolucionaria para explicar de otra manera datos oscuros, y otra muy distinta construir una hipótesis igualmente revolucionaria en ausencia de una base experimental firme. Esto último es exactamente lo que hizo Louis de Broglie en 1924 cuando propuso que la materia poseía propiedades tanto ondulatorias como corpusculares. Tan diferente del que prevalecía en el cambio de siglo era el clima intelectual en aquel tiempo, que la idea de De Broglie recibió una atención inmediata y respetuosa, a diferencia de la anterior teoría cuántica de la luz, de Planck y Einstein que difícilmente creó inquietud a pesar de su sorprendente confirmación experimental. La existencia de las ondas de De Broglie se demostró en 1927 y el principio de dualidad que representan sirvió de punto de partida en los años previos al desarrollo afortunado de la mecánica cuántica de Schrödinger.

3.1 ONDAS DE DE BROGLIE

Un fotón de luz, de frecuencia ν, tiene un ímpetu o momentum de

$$p = \frac{h\nu}{c}$$

que se puede expresar en función de la longitud de onda λ como

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

ya que $\lambda\nu = c$. La longitud de onda de un fotón está, por tanto, especificada por su momentum según la relación

3.1 $$\lambda = \frac{h}{p}$$

Por deducción intuitiva de que la naturaleza es simétrica, DeBroglie estableció que la Ec. 3.1 es una fórmula completamente general que se aplica tanto a partículas materiales como a fotones. El momentum de una partícula de masa m y velocidad v es

$$p = mv$$

y, en consecuencia, su *longitud de onda de De Broglie* es

3.2 $$\lambda = \frac{h}{mv}$$ Ondas de De Broglie

Cuanto mayor es el momentum de una partícula, menor es su longitud de onda. En la Ec. 3.2, m es la masa relativista

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

La Ec. 3.2 ha sido ampliamente comprobada con experimentos relacionados con la difracción de electrones rápidos en cristales, experimentos en cierto modo análogos a los que se utilizaron para demostrar el carácter de onda electromagnética de los rayos X. Antes de entrar en detalle con estos experimentos, es útil considerar qué clase de fenómeno ondulatorio está implicado en las ondas materiales de De Broglie. En una onda luminosa, el campo electromagnético varía en el espacio y en el tiempo; en una onda sonora, la presión varía del mismo modo. ¿En qué consisten estas variaciones en las ondas de De Broglie?

3.2 FUNCION DE ONDA

La cantidad variable que caracteriza las ondas de De Broglie se conoce con el nombre de *función de onda* y se representa por la letra griega *psi* Ψ. **El valor de la función de onda asociada con un cuerpo en movimiento en un punto particular del espacio x,y,z y en un instante t, está relacionado con la probabilidad de encontrar el cuerpo en aquel punto y en ese instante.** Sin embargo, Ψ en sí no tiene ningún significado físico directo. Hay una razón

simple por la que Ψ no se puede interpretar en función de un experimento. La probabilidad P de que algo esté en alguna parte en un momento dado puede tomar cualquier valor entre dos límites: 0 para la certeza absoluta de su ausencia y 1 para la certeza total de su presencia. (Una probabilidad de 0.2, por ejemplo, quiere decir que hay un 20% de probabilidad de encontrar el cuerpo.) Sin embargo, la amplitud de cualquier onda puede ser positiva o negativa y una probabilidad negativa es algo sin sentido. De aquí que Ψ no sea una magnitud observable.

Esta objeción desaparece para el caso de $|\Psi|^2$, el cuadrado del valor absoluto de la función de onda. Por esto y otras razones, $|\Psi|^2$ se conoce como *densidad de probabilidad*. **La probabilidad de encontrar experimentalmente el cuerpo descrito por la función de onda Ψ, en el punto x,y,z y en el instante t, es proporcional al valor de $|\Psi|^2$ en ese punto del espacio y en el instante t.** Un valor grande $|\Psi|^2$ quiere decir que existe una gran probabilidad de la presencia del cuerpo, mientras que para valores pequeños, la probabilidad es pequeña. Mientras $|\Psi|^2$ no sea 0 en algún punto concreto, existe la probabilidad, aunque sea pequeña, de encontrarlo allí. Esta interpretación la hizo por primera vez Max Born en 1926.

Hay una gran diferencia entre la probabilidad de que ocurra un evento y el evento mismo. Aunque hablemos de la función de onda Ψ que describe una partícula como si estuviera dispersa en el espacio, esto no significa que la partícula en sí lo esté. Cuando se lleva a cabo un experimento para detectar electrones, por ejemplo, se puede encontrar la totalidad de un electrón en un instante y un lugar determinados o no; no existe el 20% de un electrón. Pero sí es totalmente posible que exista un 20% de probabilidad de que un electrón se pueda encontrar en un determinado instante en un lugar, y es esta probabilidad la que se especifica por $|\Psi|^2$.

Alternativamente, si un experimento implica muchos cuerpos idénticos, regidos por la misma función de onda Ψ, la *densidad real* de los cuerpos en un punto x,y,z y en un tiempo t es proporcional al valor correspondiente de $|\Psi|^2$.

Mientras que la longitud de onda de las ondas de De Broglie asociadas con un cuerpo en movimiento viene dada por la fórmula

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

el determinar su amplitud Ψ en función de su posición en el tiempo y en el espacio es, normalmente, un problema muy complicado. En el Cap. 5 se estudiará el cálculo de Ψ y las ideas allí desarrolladas se aplicarán en el Cap. 6 a la estructura del átomo. Hasta entonces supondremos que tenemos el conocimiento necesario de Ψ para cada situación concreta.

En el caso de que una función de onda Ψ sea compleja, con partes real e imaginaria, la densidad de probabilidad la dará el producto $\Psi^* \Psi$ de Ψ y su *conjugada compleja* Ψ^*. La conjugada compleja de cualquier función se obtiene sustituyendo $i\ (= \sqrt{-1})$ por $-i$ en la función. Toda función compleja Ψ se puede escribir en la forma

$$\Psi = A + iB$$

donde A y B son funciones reales. La conjugada compleja Ψ^* de Ψ es

$$\Psi^* = A - iB$$

y, por tanto,

$$\Psi^* \Psi = A^2 - i^2 B^2 = A^2 + B^2$$

ya que $i^2 = -1$. Por tanto, $\Psi^* \Psi$ es siempre una cantidad real positiva.

3.3 VELOCIDAD DE ONDA DE DE BROGLIE

¿Con qué velocidad se propagan las ondas de De Broglie? Puesto que hemos asociado las ondas de De Broglie con un cuerpo en movimiento, es razonable suponer que estas ondas se propagan a la misma velocidad v del cuerpo. Si llamamos w a la velocidad de la onda de De Broglie, podremos aplicar la fórmula

$$w = \nu\lambda$$

para determinar su valor. La longitud de onda λ es la longitud de onda de De Broglie

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

La frecuencia ν viene dada por la ecuación cuántica

$$E = h\nu$$

En consecuencia,

$$\nu = \frac{E}{h}$$

o, como

$$E = mc^2$$

tenemos

$$\nu = \frac{mc^2}{h}$$

La velocidad de onda de De Broglie es, por consiguiente,

3.3
$$w = \nu\lambda$$
$$= \frac{mc^2}{h}\frac{h}{mv}$$
$$= \frac{c^2}{v}$$

Como la velocidad v de la partícula debe ser menor que la velocidad de la luz c, ¡resulta que la velocidad de onda de De Broglie w es siempre mayor que c! Es evidente que v y w nunca son iguales para un cuerpo en movimiento. Con el fin de poder comprender este resultado inesperado, consideraremos brevemente los conceptos de *velocidad de fase* y *velocidad de grupo*. (La velocidad de fase es llamada algunas veces *velocidad de onda*.)

Comenzaremos examinando cómo puede describirse matemáticamente una onda. Para mayor claridad, consideraremos una cuerda extendida a lo largo del eje x y cuyas vibraciones se hacen en la dirección y, Fig. 3-1, y son de carácter armónico simple. Si elegimos el momento $t = 0$ cuando el desplazamiento y de la cuerda para $x = 0$ es un máximo, cualquier desplazamiento en un momento posterior t, en el mismo lugar, queda descrito por la fórmula

3.4
$$y = A \cos 2\pi\nu t$$

donde A es la amplitud de las vibraciones (es decir, su desplazamiento máximo sobre un lado u otro del eje x) y ν su frecuencia.

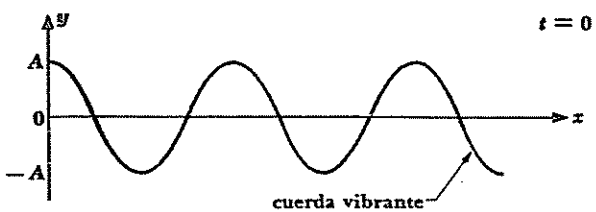
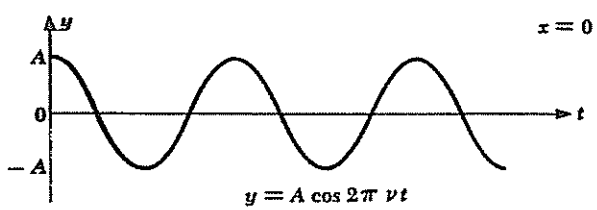


FIGURA 3-1 Movimiento ondulatorio.



La Ec. 3.4 nos dice que el desplazamiento de un punto cualquiera sobre la cuerda es función del tiempo t. Un estudio completo del movimiento ondulatorio en una cuerda extendida nos diría, sin embargo, cuál es el valor de y en *cualquier* punto de la cuerda y en *cualquier* momento. Nos interesa una fórmula que nos dé y en función tanto de x como de t. Para obtener esta fórmula, imaginemos que hacemos vibrar la cuerda en $x = 0$ cuando $t = 0$, de modo que una onda inicie su propagación en el sentido $+x$ (Fig. 3-2). Esta onda tiene cierta velocidad w, que depende de las propiedades de la cuerda.

www.elsolucionario.org

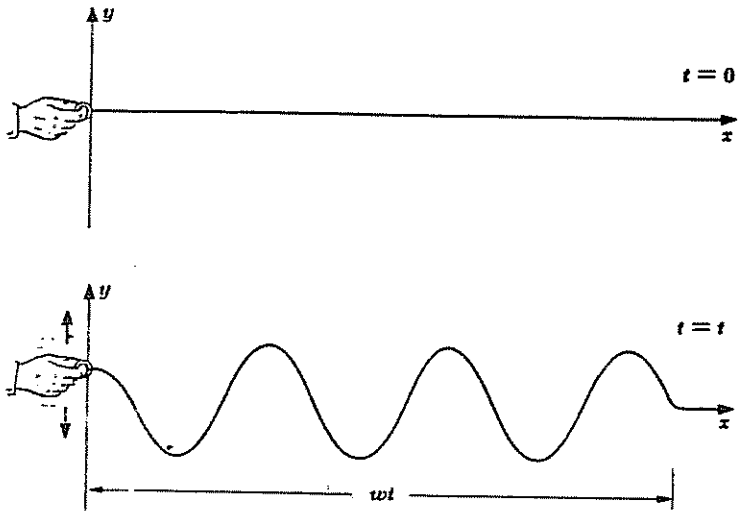


FIGURA 3-2 Propagación de ondas.

La onda recorre la distancia $x = wt$ en el tiempo t; por tanto, el intervalo de tiempo entre la formación de la onda en $x = 0$ y su llegada al punto x es x/w. En consecuencia, el desplazamiento y de la cuerda para cualquier valor de x y en cualquier momento t es exactamente el mismo que el valor de y en $x = 0$ *en un momento anterior* $t - x/w$. Por simple sustitución de t por $t - x/w$ en la Ec. 3.4, tenemos la fórmula que nos da y en función de x y t:

3.5 $$y = A \cos 2\pi\nu\left(t - \frac{x}{w}\right)$$

Podemos observar, como comprobación, que la Ec. 3.5 se reduce a la Ec. 3.4 en $x = 0$.

La Ec. 3.5 se puede volver a escribir como

$$y = A \cos 2\pi\left(\nu t - \frac{\nu x}{w}\right)$$

Ya que

$$w = \nu\lambda$$

tenemos

3.6 $$y = A \cos 2\pi\left(\nu t - \frac{x}{\lambda}\right)$$

La Ec. 3.6 es, a menudo, de aplicación más conveniente que la Ec. 3.5.

Sin embargo, tal vez la fórmula más usada de una onda sea una diferente de la Ec. 3.5. La *frecuencia angular* ω y la *constante de propagación* k se definen por las fórmulas

3.7 $$\omega = 2\pi\nu$$ Frecuencia angular

3.8 $$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$ Constante de propagación o número de onda

3.9 $$= \frac{\omega}{w}$$

La unidad de ω es el rad/seg y la de k es el rad/m. La frecuencia angular toma su nombre del movimiento circular uniforme, donde una partícula que se mueve sobre una circunferencia a razón de ν vueltas por segundo recorre $2\pi\nu$ radianes por segundo. La constante de propagación es igual al número de radianes correspondientes a un tren de ondas de 1 m de longitud, ya que hay 2π radianes en una onda completa. En función de ω y k, la Ec. 3.5 queda

3.10 $$y = A \cos(\omega t - kx)$$

En el espacio tridimensional, k se transforma en el vector k normal al frente de ondas y x es el radio vector r. El producto escalar $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ se utiliza entonces en lugar de kx en la Ec. 3.10.

3.4 VELOCIDADES DE FASE Y DE GRUPO

La amplitud de las ondas de De Broglie de un cuerpo en movimiento refleja la probabilidad de que a éste se le encuentre en un punto y en un momento determinados. Es claro que las ondas de De Broglie no se pueden representar por una fórmula similar a la Ec. 3.10, que describe una serie indefinida de ondas de la misma amplitud A. En realidad, esperamos que la representación de la onda de un cuerpo en movimiento corresponda a un *paquete de ondas*, o *grupo de ondas*, como las que se muestran en la Fig. 3-3, cuyas ondas constitutivas tengan amplitudes de las que dependa la probabilidad de detectar el cuerpo.

Un ejemplo conocido de cómo se originan los grupos de ondas es el caso de las pulsaciones. Cuando se producen simultáneamente dos ondas sonoras de

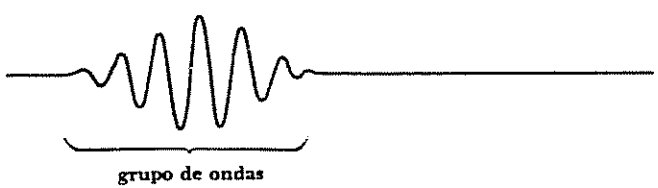


FIGURA 3-3 Un grupo de ondas.

la misma amplitud, pero de frecuencia ligeramente distinta, el sonido que oímos tiene una frecuencia que es igual al promedio de las dos frecuencias originales y una amplitud que aumenta y disminuye periódicamente. Las fluctuaciones de la amplitud se producen un número de veces por segundo igual a la diferencia entre las dos frecuencias originales. Si los sonidos originales tienen frecuencias de, por ejemplo, 440 y 442 Hz, oímos un sonido fluctuante de 441 Hz, con dos picos de intensidad por segundo llamados *pulsaciones*. La Fig. 3.4 ilustra la producción de pulsaciones.

Una manera de describir matemáticamente un grupo de ondas es hacerlo en términos de una superposición de ondas individuales, cada una con longitud de onda diferente, que al interferir entre sí dan por resultado variaciones en las amplitudes que definen la forma del grupo. Si todas las velocidades de onda son iguales, la velocidad con que el grupo de ondas se propaga es idéntica a la común. Sin embargo, si la velocidad de onda varía con la longitud de onda, entonces las ondas individuales no avanzan juntas y el grupo de ondas tiene una velocidad diferente de las ondas que lo componen.

No es difícil calcular la velocidad u con que se propaga un grupo de ondas. Supongamos que un grupo de ondas se produce por la combinación de dos ondas de la misma amplitud A, pero que difieren en su frecuencia angular y en su constante de propagación $d\omega$ y dk, respectivamente. Podemos representar las ondas originales por las fórmulas

$$y_1 = A\cos(\omega t - kx)$$
$$y_2 = A\cos[(\omega + d\omega)t - (k + dk)x]$$

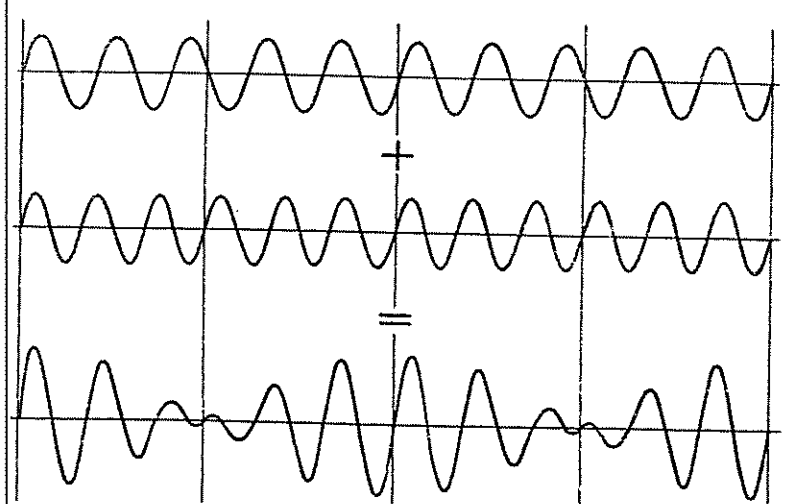


FIGURA 3-4 Producción de pulsaciones.

El desplazamiento resultante y en un tiempo t y en una posición x es la suma de y_1 y y_2. Con ayuda de la identidad

$$\cos\alpha + \cos\beta = 2\cos\tfrac{1}{2}(\alpha + \beta)\cos\tfrac{1}{2}(\alpha - \beta)$$

y de la relación

$$\cos(-\theta) = \cos\theta$$

tenemos

$$\begin{aligned} y &= y_1 + y_2 \\ &= 2A\cos\tfrac{1}{2}[(2\omega + d\omega)t - (2k + dk)x]\cos\tfrac{1}{2}(d\omega\, t - dk\, x) \end{aligned}$$

Puesto que $d\omega$ y dk son pequeños, comparados con ω y k respectivamente,

$$2\omega + d\omega \approx 2\omega$$
$$2k + dk \approx 2k$$

y

3.11 $$y = 2A\cos(\omega t - kx)\cos\left(\frac{d\omega}{2}t - \frac{dk}{2}x\right)$$

La Ec. 3.11 representa una onda de frecuencia angular ω y constante de propagación k que tiene sobrepuesta una modulación de frecuencia angular $\frac{1}{2}d\omega$ y constante de propagación $\frac{1}{2}dk$. El efecto de la modulación es producir grupos de ondas sucesivos (Fig. 3-4). La velocidad de fase w es

3.12 $$w = \frac{\omega}{k}$$ **Velocidad de fase**

mientras que la velocidad u del grupo de ondas es

3.13 $$u = \frac{d\omega}{dk}$$ **Velocidad de grupo**

En general, la velocidad de grupo puede ser mayor o menor que la velocidad de fase, dependiendo de cómo pueda variar ésta con la longitud de onda en un medio determinado. Si la velocidad de fase es la misma para todas las longitudes de onda, son idénticas las velocidades de grupo y de fase.

La frecuencia angular y la constante de propagación de las ondas de De Broglie, asociadas con un cuerpo en movimiento de masa en reposo m_0 y velocidad v, son:

3.14 $$\begin{aligned} \omega &= 2\pi\nu \\ &= \frac{2\pi mc^2}{h} \\ &= \frac{2\pi m_0 c^2}{h\sqrt{1 - v^2/c^2}} \end{aligned}$$

y

3.15 $$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$= \frac{2\pi m v}{h}$$

$$= \frac{2\pi m_0 v}{h\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Las magnitudes ω y k son funciones de la velocidad v. La velocidad de fase w, como ya hemos visto, es

$$w = \frac{\omega}{k}$$

$$= \frac{c^2}{v}$$

que es mayor que la velocidad del cuerpo v y que la velocidad de la luz c, ya que $v < c$.

La velocidad de grupo u de las ondas de De Broglie asociadas con el cuerpo es

$$u = \frac{d\omega}{dk}$$

$$= \frac{d\omega/dv}{dk/dv}$$

Ahora

$$\frac{d\omega}{dv} = \frac{2\pi m_0 v}{h(1 - v^2/c^2)^{3/2}}$$

y

$$\frac{dk}{dv} = \frac{2\pi m_0}{h(1 - v^2/c^2)^{3/2}}$$

por tanto, la velocidad de grupo es

3.16 $$u = v$$

El grupo de ondas de De Broglie asociado con on un cuerpo en movimiento se propaga con la misma velocidad de éste. La velocidad de fase w de las ondas de De Broglie no tiene en sí misma un significado físico sencillo.

3.5 DIFRACCION DE PARTICULAS

Una manifestación ondulatoria que no tiene analogía con el comportamiento newtoniano de las partículas es la difracción. En 1927, Davisson y Germer en los Estados Unidos, y G.P. Thomson en Inglaterra, confirmaron, independientemente, la hipótesis de De Broglie, demostrando que los electrones se

difractan al ser dispersados en cristales cuyos átomos tienen un espaciamiento adecuado. Consideremos el experimento de Davisson y Germer porque su interpretación es más directa.

Davisson y Germer estudiaron la dispersión de electrones en sólidos, utilizando un aparato como el que se ilustra en la Fig. 3-5. La energía de los electrones en el rayo primario, el ángulo de incidencia sobre el blanco y la posición del detector pueden ser variables. La física clásica predice que los electrones dispersados emergen en todas las direcciones dependiendo poco del ángulo de incidencia y aun menos de la energía de los electrones primarios. Davisson y Germer comprobaron estas predicciones utilizando un bloque de níquel como blanco.

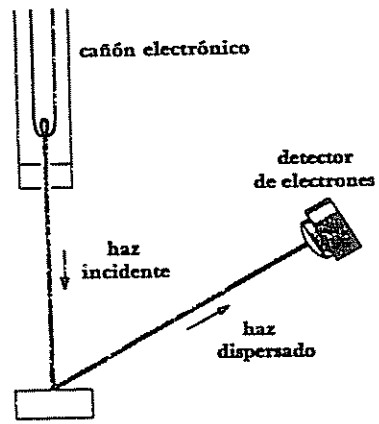


FIGURA 3-5 Experimento de Davisson-Germer.

En el curso de su trabajo tuvieron un accidente que permitió la entrada de aire en el aparato, con la consiguiente oxidación de la superficie del metal. Para reducir a níquel puro el óxido formado, el blanco se calentó en un horno a altas temperaturas. A continuación se volvió a colocar en el aparato y se reanudaron las mediciones. Los resultados que se obtuvieron fueron muy diferentes a los obtenidos antes del accidente: en lugar de una variación continua de la intensidad de los electrones dispersados según el ángulo de incidencia, se observaron máximos y mínimos cuya posición dependía de la energía de los electrones. En la Fig. 3-6 se representan gráficas polares típicas de la intensidad electrónica después del accidente; el método de representación es tal que la intensidad, para cualquier ángulo, es proporcional a la distancia de la curva con ese ángulo, al punto de dispersión.

Dos preguntas surgen inmediatamente: ¿por qué motivo se produce este nuevo efecto?, ¿por qué ocurrió después de calentar el blanco de níquel?

www.elsolucionario.org

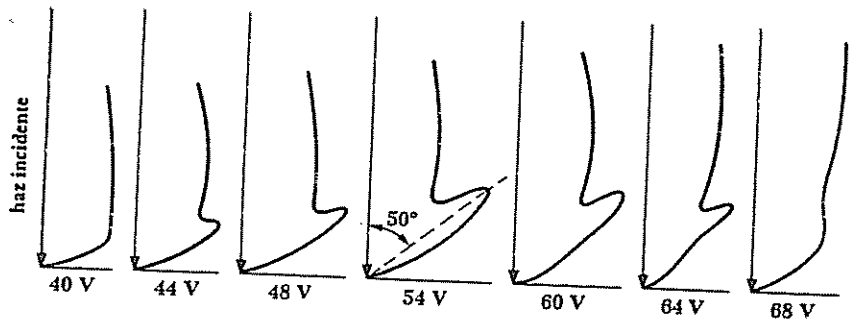


FIGURA 3-6 Resultados del experimento de Davisson-Germer.

La hipótesis de De Broglie sugería la interpretación de que las ondas de electrones las difractaba el blanco, en forma similar a como los rayos X son difractados por planos de átomos en un cristal. Esta interpretación se confirmó cuando se aclaró que el efecto del calentamiento de bloque de níquel a altas temperaturas era producir un solo monocristal a partir de los muchos cristales pequeños que lo componían, quedando todos los átomos dispuestos en una red regular.

Veamos si se puede verificar que las ondas de De Broglie son la causa del hallazgo de Davisson y Germer. En un cierto experimento, se dirigió un haz de electrones de 54 eV perpendicularmente al blanco de níquel y se observó un máximo en la distribución de electrones en cualquier dirección que formara un ángulo de 50° con el haz original. Los ángulos de incidencia y de dispersión relativos a la familia de planos de Bragg, que se muestra en la Fig. 3-7, serán ambos de 65°. La distancia entre planos de esta familia, que se puede medir por difracción de rayos X, es 0.91 Å. La ecuación de Bragg para los máximos en el modelo de difracción es

$$n\lambda = 2d \operatorname{sen} \theta$$

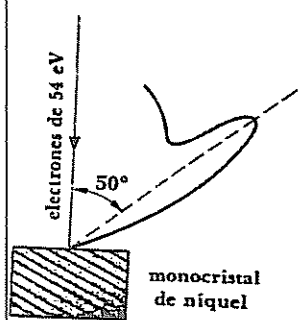


FIGURA 3-7 La difracción de las ondas de De Broglie por el blanco es la causa de los resultados de Davisson y Germer.

Aquí, $d = 0.91$ Å y $\theta = 65°$; considerando que $n = 1$, la longitud de onda de De Broglie λ de los electrones difractados es

$$\begin{aligned} n\lambda &= 2d \operatorname{sen} \theta \\ &= 2 \times 0.91 \text{ Å} \times 65° \\ &= 1.65 \text{ Å} \end{aligned}$$

Con la fórmula de De Broglie

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

podemos calcular la longitud de onda de los electrones. La energía cinética del electrón de 54 eV es pequeña comparada con su energía en reposo m_0c^2 de 5.1×10^5 eV, así que se pueden pasar por alto consideraciones relativistas. Como

$$T = \tfrac{1}{2}mv^2$$

el momentum del electrón mv es

$$\begin{aligned} mv &= \sqrt{2mT} \\ &= \sqrt{2 \times 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 54 \text{ eV} \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ J/eV}} \\ &= 40 \times 10^{-24} \text{ kg-m/s} \end{aligned}$$

La longitud de onda del electrón es, por consiguiente,

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{h}{mv} \\ &= \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ J-s}}{4.0 \times 10^{-24} \text{ kg-m/s}} \\ &= 1.66 \times 10^{-10} \text{ m} \\ &= 1.66 \text{ Å} \end{aligned}$$

que concuerda con la longitud de onda observada. El experimento de Davisson y Germer nos proporciona así una comprobación directa de la hipótesis de De Broglie sobre la naturaleza ondulatoria de los cuerpos en movimiento.

El análisis del experimento de Davisson-Germer no es realmente tan sencillo como se ha indicado anteriormente, ya que la energía de un electrón aumenta cuando penetra en un cristal, en una cantidad igual a la función de trabajo de la superficie. De aquí que la velocidad del electrón en el experimento fuese mayor en el interior del cristal, y que la correspondiente longitud de onda de De Broglie fuese más corta que los valores correspondientes fuera del cristal. Surge una complicación adicional debido a interferencias entre las ondas difractadas por las diferentes familias de planos de Bragg, que restringen la aparición de máximos para ciertas combinaciones de la energía del electrón y

del ángulo de incidencia, en vez de simplemente para cualquier combinación que obedezca a la ecuación de Bragg.

No son solamente los electrones los cuerpos cuyo comportamiento ondulatorio se puede demostrar. Los neutrones y los átomos completos producen difracción cuando se dispersan en un cristal apropiado. De hecho la difracción de neutrones, como la de rayos X y electrones, es ampliamente utilizada hoy día como instrumento de investigación de estructuras cristalinas.

Como en el caso de las ondas electromagnéticas, los aspectos ondulatorios y corpusculares de los cuerpos en movimiento nunca se pueden observar simultáneamente, de manera que no podemos determinar cuál es la descripción "correcta". Todo cuanto podemos decir es que en algunos casos un cuerpo en movimiento muestra propiedades ondulatorias y en otros presenta propiedades corpusculares. El determinar qué conjunto de propiedades es más evidente depende de la relación entre la longitud de onda de De Broglie y las dimensiones del cuerpo que se considera: la longitud de onda de 1.66 Å de un electrón de 54 eV es del mismo orden de magnitud que el espaciamiento de la red de un cristal de níquel, pero la longitud de onda de un automóvil que se desplaza a 90 km/h es aproximadamente 1.5×10^{-38} m, que es demasiado pequeña para manifestarse.

3.6 EL PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE

El hecho de que un cuerpo en movimiento se considere como un grupo de ondas de De Broglie en vez de como una entidad localizada, sugiere que existe un límite fundamental para la precisión con que podemos medir sus propiedades corpusculares. La Fig. 3-8*a* muestra un grupo de ondas de De Broglie: a la partícula se le puede encontrar en cualquier lugar dentro del grupo de ondas. Si el grupo es muy estrecho, Fig. 3-8*b*, la posición de la partícula se determina con facilidad, pero es imposible establecer su longitud de onda. Por el contrario, si el grupo es ancho, Fig. 3-8*c*, permite un cálculo satisfactorio de la longitud de onda, pero ¿dónde se localiza la partícula?

Un argumento lógico, que se basa en la naturaleza de un grupo de ondas, nos permite relacionar la incertidumbre Δx inherente a la medición de la posición de una partícula con la incertidumbre Δp inherente a la medición simultánea de su momentum.

El ejemplo más sencillo de la formación de grupos de ondas se presenta en la Sec. 3.4, donde dos trenes de ondas ligeramente diferentes en frecuencia angular ω y constante de propagación k se superponen para dar las series de grupos que se indican en la Fig. 3-4. Consideremos aquí los grupos de ondas que surgen cuando se combinan las ondas de De Broglie

$$\Psi_1 = A \cos(\omega t - kx)$$
$$\Psi_2 = A[\cos(\omega + \Delta\omega)t - (k + \Delta k)x]$$

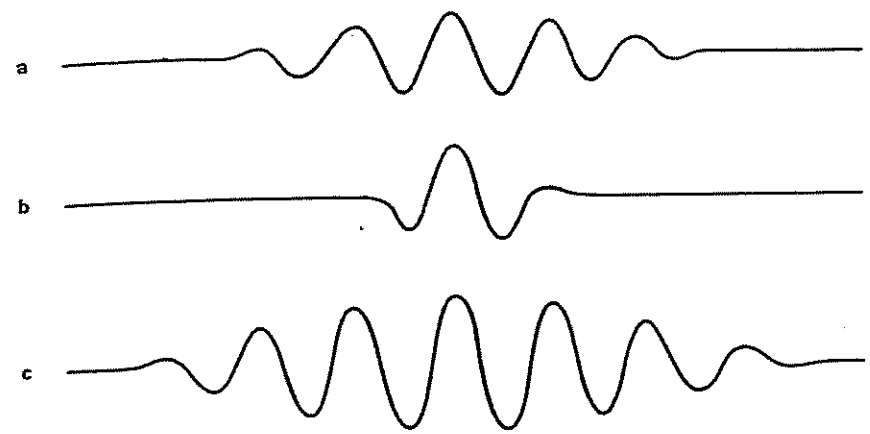


FIGURA 3-8 La anchura de un grupo de ondas es una medida de la incertidumbre en la posición de la partícula que representa. Cuanto más estrecho es el grupo de ondas, mayor es la incertidumbre en la longitud de onda.

Del mismo modo que se obtuvo la Ec. 3.11, encontramos ahora

3.17 $$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 \approx 2A \cos(\omega t - kx) \cos(\tfrac{1}{2}\Delta\omega\, t - \tfrac{1}{2}\Delta k\, x)$$

que se representa en la Fig. 3-9. La extensión de cada grupo es evidentemente igual a la mitad de la longitud de onda λ_m de la modulación. Se puede suponer razonablemente que esta extensión es del mismo orden de magnitud que la incertidumbre Δx inherente a la posición del grupo, es decir,

3.18 $$\Delta x \approx \tfrac{1}{2}\lambda_m$$

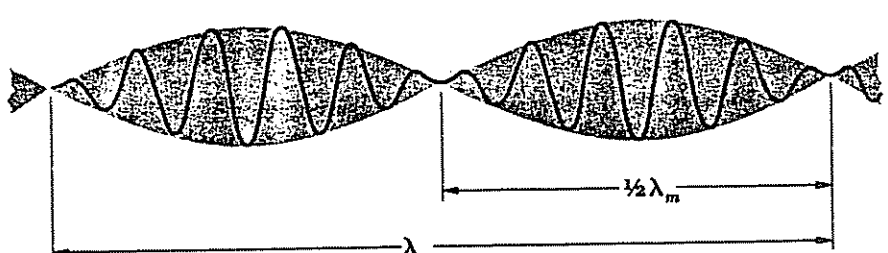


FIGURA 3-9 Grupos de ondas que resultan de la interferencia de trenes de ondas que tienen la misma amplitud, pero diferente frecuencia.

La longitud de onda de la modulación está relacionada con su constante de propagación k_m por

$$\lambda_m = \frac{2\pi}{k_m}$$

De la Ec. 3.17 vemos que la constante de propagación de la modulación es

$$k_m = \tfrac{1}{2}\Delta k$$

con lo que resulta que

$$\lambda_m = \frac{2\pi}{\frac{1}{2}\Delta k}$$

y

$$\Delta x \approx \frac{2\pi}{\Delta k}$$

3.19 $$\Delta x\, \Delta k \approx 2\pi$$

Un cuerpo en movimiento corresponde a un grupo de ondas único, no a una sucesión de ellos, pero también se puede considerar a un grupo de ondas único como una sucesión de trenes de ondas armónicas. Sin embargo, se requiere de un número infinito de trenes de onda de frecuencias constantes de propagación y amplitudes diferentes para formar un grupo aislado de forma arbitraria.

En un tiempo t determinado, el grupo de onda $\Psi(x)$ se puede representar por la *integral de Fourier*

3.20 $$\Psi(x) = \int_0^\infty g(k) \cos kx\, dk$$

donde la función $g(k)$ describe la forma en que varían las amplitudes de las ondas que contribuyen a $\Psi(x)$ con la constante de propagación k. Esta función recibe el nombre de *transformación de Fourier* de $\Psi(x)$, y define el grupo de ondas con la misma plenitud que $\Psi(x)$. La Fig. 3-10 presenta gráficas de las transformaciones de Fourier de un pulso y de un grupo de ondas. También se incluye, como referencia, la transformación de Fourier de un tren infinito de ondas armónicas; por supuesto, en este caso existe solamente una constante de propagación.

Estrictamente hablando, las constantes de propagación necesarias para representar a un grupo de ondas van de $k = 0$ a $k = \infty$, pero para un grupo cuya longitud Δx es finita, las ondas cuyas amplitudes $g(k)$ son apreciables tienen constantes de propagación que entran dentro de un intervalo finito Δk. Como se ve en la Fig. 3-10, cuanto más corto sea el grupo, más amplio será el número de constantes de propagación necesario para describirlo, y viceversa. La relación entre la distancia Δx y la extensión de la constante de propagación Δk depende de la forma del grupo de ondas y de cómo se definen Δx y Δk. Se tiene el valor mínimo del producto $\Delta x\, \Delta k$ cuando el grupo presenta la forma de una

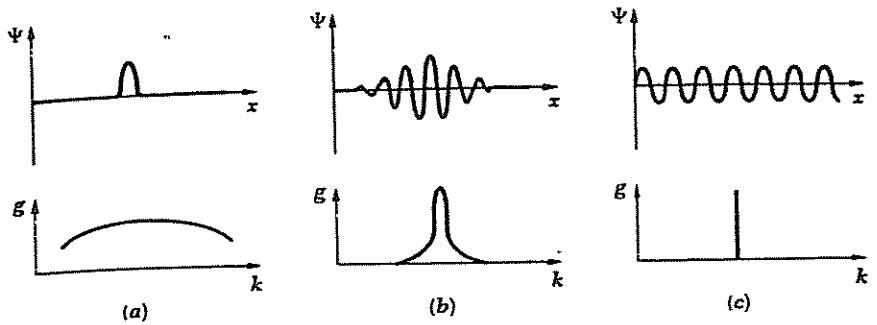


FIGURA 3-10 Funciones de onda y transformaciones de Fourier para *a*) un pulso, *b*) un grupo de ondas, y *c*) un tren de ondas infinito. Para describir una perturbación breve se necesita un margen de frecuencias más amplio que para describir una perturbación de mayor duración.

función de Gauss, en cuyo caso su transformación de Fourier es también una función de Gauss. Si consideramos a Δx y Δk como desviaciones normales de sus funciones respectivas $\Psi(x)$ y $g(k)$, entonces $\Delta x\, \Delta k = \frac{1}{2}$. En general, $\Delta x\, \Delta k$ es del orden de 1:

3.21 $$\Delta x\, \Delta k \approx 1$$

La longitud de onda de De Broglie de una partícula de momentum p es

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

La constante de propagación correspondiente a esa longitud de onda es

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$= \frac{2\pi p}{h}$$

Por tanto, una incertidumbre Δk en la constante de propagación de las ondas de De Broglie asociadas con una partícula da por resultado una incertidumbre Δp en el momentum, según la fórmula

$$\Delta p = \frac{h\, \Delta k}{2\pi}$$

Como $\Delta x\, \Delta k \approx 1$, $\Delta k \approx 1/\Delta x$ y

3.22 $$\Delta x\, \Delta p \geqslant \frac{h}{2\pi}$$ **Principio de incertidumbre**

Se usa el signo $\geqslant$ ya que Δx y Δp son *mínimos irreductibles como consecuencia de la naturaleza ondulatoria de los cuerpos en movimiento;* cualquier

www.elsolucionario.org

incertidumbre instrumental o estadística que se produzca durante el curso de la medición incrementa solamente el producto $\Delta x\,\Delta p$.

La Ec. 3.22 es una forma del *principio de incertidumbre* obtenido por primera vez por Werner Heisenberg en 1927. En él se establece que el producto de la incertidumbre Δx en la posición de un cuerpo, en un instante determinado, por la incertidumbre en su momentum Δp en el mismo instante es igual o mayor que $h/2\pi$. No se puede medir con absoluta precisión, simultáneamente, la posición y el momentum. Si hacemos que Δx sea pequeño, como sería por ejemplo para el grupo estrecho de ondas de la Fig. 3-8*b*, Δp será grande. Si por el contrario Δp es pequeño, como corresponde al amplio grupo de ondas de la Fig. 3-8*c*, Δx será entonces grande. Estas incertidumbres no se deben a aparatos inadecuados, sino al carácter impreciso de la naturaleza de las cantidades consideradas.

La cantidad $h/2\pi$ aparece con mucha frecuencia en la física moderna debido a que, además de su relación con el principio de incertidumbre, $h/2\pi$ también es la unidad básica de momentum angular. Se acostumbra abreviar la expresión $h/2\pi$ por el símbolo $\hbar$:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054 \times 10^{-34}\ \text{J-s}$$

En el resto del libro usaremos $\hbar$ en lugar de $h/2\pi$.

Se puede llegar al principio de incertidumbre por varios caminos. Vamos a obtenerlo ahora basando nuestros argumentos en la naturaleza corpuscular de las ondas, en lugar de hacerlo con base en las propiedades ondulatorias de las partículas, como hicimos anteriormente.

Supongamos que se desea medir la posición y el momentum de algo en un instante determinado. Para realizarlo, tendríamos que estimularlo con algo que nos proporcionara la información deseada; es decir, tendríamos que tocarlo con los dedos, iluminarlo con luz o hacerlo interaccionar de algún otro modo. Un electrón se puede examinar con la ayuda de luz de longitud de onda λ, Fig. 3-11. En este proceso, los fotones luminosos golpean al electrón y salen despedidos. Cada fotón posee el momentum h/λ, y al entrar en colisión con el electrón, éste sufre una variación en su momentum p. La magnitud precisa de este cambio no se puede predecir, pero es probable que sea del mismo orden de magnitud que el momentum del fotón h/λ. De este modo, la *realización de la medición* introduce una incertidumbre de

3.23 $$\Delta p \approx \frac{h}{\lambda}$$

en el momentum del electrón. Cuanto mayor sea la longitud de onda de la luz empleada para "ver" al electrón, más pequeña será la incertidumbre de su momentum.

Como la luz tiene propiedades ondulatorias, no podemos esperar determinar la posición del electrón con una precisión infinita bajo cualquier

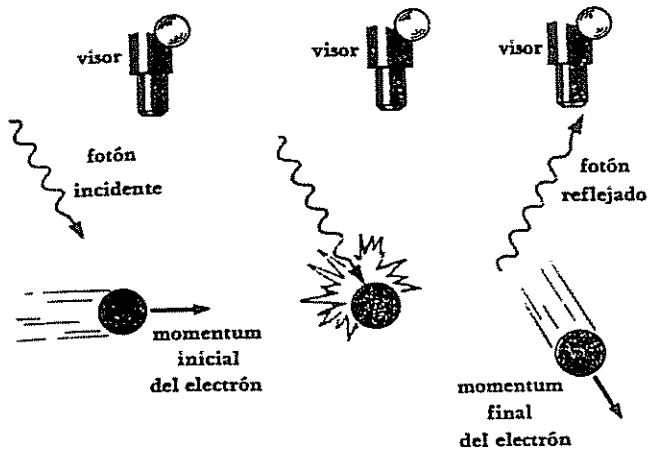


FIGURA 3-11 Un electrón no se puede observar sin variar su momentum.

circunstancia. Sin embargo, es razonable esperar el poder mantener la incertidumbre de posición Δx a una longitud de onda de la luz que se utiliza. Esto es

3.24 $$\Delta x \approx \lambda$$

Cuanto menor sea la longitud de onda, menor será la incertidumbre en la posición del electrón.

De las Ecs. 3.23 y 3.24 se desprende que si se emplea luz de longitud de onda pequeña para mejorar la precisión de la determinación de posición, habrá una reducción correspondiente en la precisión de la determinación del momentum. Por el contrario, luz de longitud de onda grande dará buenos resultados en la determinación del momentum, pero también dará valores muy imprecisos de su posición. Sustituyendo $\lambda = \Delta x$ en la Ec. 3.23 tenemos

3.25 $$\Delta x\,\Delta p \geqslant h$$

Este resultado concuerda con la Ec. 3.22, ya que tanto Δx como Δp se definen aquí en forma pesimista.

Argumentos como el anterior, aunque superficialmente atractivos, se deben seguir como regla con cierta precaución. El argumento anterior implica que el electrón puede poseer una posición y un momentum definidos en cualquier instante, y que el proceso de medición es el que introduce la indeterminación en $\Delta x\,\Delta p$. Por el contrario, esta indeterminación es inherente a la naturaleza del cuerpo móvil. La justificación de muchas "deducciones" de esta clase es, primero, que ellas demuestran que es imposible imaginar una forma de evitar el principio de incertidumbre, y, segundo, que presentan un aspecto de este principio que se puede apreciar en un contexto más conocido que el de los paquetes de ondas.

3.7 APLICACIONES DEL PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE

La constante de Planck h es tan pequeña (su valor es solamente de 6.63×10^{-34} J-s) que las limitaciones impuestas por el principio de incertidumbre son sólo significativas en el dominio del átomo. A escala microscópica hay, sin embargo, muchos fenómenos que se pueden explicar a la luz de este principio; consideraremos algunos de ellos.

Un problema interesante es saber si existen electrones en el núcleo atómico. Como veremos más adelante, el radio del núcleo común tiene un valor inferior a 10^{-14} m. Para que un electrón esté comprendido dentro del núcleo, la incertidumbre de su posición no debe exceder a 10^{-14} m. La incertidumbre correspondiente de su momentum será

$$\begin{aligned}\Delta p &\geqslant \frac{\hbar}{\Delta x} \\ &\geqslant \frac{1.054 \times 10^{-34}\ \text{J-s}}{10^{-14}\ \text{m}} \\ &\geqslant 1.1 \times 10^{-20}\ \text{kg-m/s}\end{aligned}$$

Si ésta es la incertidumbre del momentum del electrón, el momentum en sí debe ser comparable en magnitud. Un electrón cuyo momentum es 1.1×10^{-20} kg-m/s tiene una energía cinética T muchas veces mayor que su energía en reposo m_0c^2 y, por consiguiente, podemos utilizar la fórmula relativista extrema

$$T = pc$$

para hallar T. Sustituyendo p y c, obtenemos

$$\begin{aligned}T &= 1.1 \times 10^{-20}\ \text{kg-m/s} \times 3 \times 10^{8}\ \text{m/s} \\ &= 3.3 \times 10^{-12}\ \text{J}\end{aligned}$$

Puesto que $1\ \text{eV} = 1.6 \times 10^{-19}$ J, la energía cinética del electrón para que éste sea constituyente del núcleo debe ser superior a 20 MeV. Los experimentos indican que los electrones, aun los que están unidos a átomos inestables, nunca tienen una energía mayor que una fracción de aquélla. Por tanto, se puede concluir que los electrones no se pueden encontrar en el interior de los núcleos.

Veamos ahora qué energía requiere un electrón para estar dentro de un átomo. El átomo de hidrógeno tiene alrededor de 5×10^{-11} m de radio. Por tanto, la incertidumbre de la posición de su electrón no puede exceder de este número. La incertidumbre en el momentum es

$$\Delta p = 2.1 \times 10^{-24}\ \text{kg-m/s}$$

Un electrón cuyo momentum es de este orden no se comporta según las leyes de la relatividad, y su energía cinética es

$$\begin{aligned}T &= \frac{p^2}{2m} \\ &= \frac{(2.1 \times 10^{-24}\ \text{kg-m/s})^2}{2 \times 9.1 \times 10^{-31}\ \text{kg}} \\ &= 2.4 \times 10^{-18}\ \text{J}\end{aligned}$$

o aproximadamente 15 eV. Esta cifra es totalmente posible.

Algunas veces es útil otra forma del principio de incertidumbre. Puede ser interesante medir la energía E emitida durante el intervalo de tiempo Δt en un proceso atómico. Si la energía se encuentra en forma de ondas electromagnéticas, el tiempo limitado disponible restringe la precisión con que se puede determinar la frecuencia ν de las ondas. Supongamos que la incertidumbre en el número de ondas que contamos en un grupo es de solamente una onda. Puesto que la frecuencia de las ondas en estudio es igual al número de ondas contadas dividido entre el intervalo de tiempo, la incertidumbre $\Delta\nu$ en la medida de la frecuencia es

$$\Delta\nu = \frac{1}{\Delta t}$$

La correspondiente incertidumbre de la energía será

$$\Delta E = h\,\Delta\nu$$

y, por tanto,

$$\Delta E = \frac{h}{\Delta t}$$

o bien,

$$\Delta E\,\Delta t \geqslant h$$

Un cálculo más realista será

3.26 $$\Delta E\,\Delta t \geqslant \hbar$$

La Ec. 3.26 establece que el producto de la incertidumbre ΔE de una medición de energía por la incertidumbre Δt del tiempo en el que se efectúa es igual o mayor que $\hbar$.

Como un ejemplo de la importancia de la Ec. 3.26 podemos considerar la radiación luminosa de un átomo "excitado". Un átomo en estas condiciones se despoja de su exceso de energía emitiendo uno o más fotones de una frecuencia característica. El periodo promedio que transcurre desde la excitación de un átomo y la radiación es de 10^{-8} s. Así, la energía del fotón tiene una incertidumbre de

$$\begin{aligned}\Delta E &= \frac{\hbar}{\Delta t} \\ &= \frac{1.054 \times 10^{-34}\ \text{J-s}}{10^{-8}\ \text{s}} = 1.1 \times 10^{-26}\ \text{J}\end{aligned}$$

y la de la frecuencia de la luz viene dada por

$$\Delta\nu = \frac{\Delta E}{h}$$
$$= 1.6 \times 10^7\ \text{Hz}$$

Este es el límite irreductible de la precisión con que se puede determinar la frecuencia de la radiación emitida por un átomo.

3.8 LA DUALIDAD ONDA-PARTICULA

A pesar de la abundancia de demostraciones experimentales, para algunos de nosotros resulta difícil apreciar cómo lo que normalmente consideramos una onda puede ser también una partícula, y viceversa. El principio de incertidumbre proporciona una perspectiva válida sobre esta cuestión que hace posible establecer estas afirmaciones, como las del final de la Sec. 2.2, sobre una base más concreta.

La Fig. 3-12 muestra un dispositivo experimental en el que la luz difractada por una doble ranura se detecta en una "pantalla" que consta de varias células fotoeléctricas adyacentes. Las células fotoeléctricas reaccionan con fotones, que tienen todas las propiedades de las partículas. Sin embargo, cuando representamos de manera gráfica el número de fotones que cada célula cuenta en un determinado periodo con relación a la localización de la célula, obtenemos la gráfica característica que resulta de la interferencia de un par de trenes de onda coherentes. Esta gráfica se presenta aun cuando la intensidad de la luz es tan baja que, en promedio, cada vez se encuentra en el aparato un solo fotón. El problema es el siguiente: ¿cómo puede un fotón que pasa a través de una de las ranuras ser afectado por la presencia de la otra ranura? En otras palabras, ¿cómo puede un fotón interferir consigo mismo? Este problema no surge en el caso de ondas, que se esparcen en el espacio, pero parece tener significado en el caso de los fotones, cuyo comportamiento sugiere que se localizan en regiones muy pequeñas del espacio.

Para que tenga sentido, toda pregunta o afirmación en la ciencia debe ser finalmente reducible a un experimento. Aquí el experimento aplicable sería el que detectara cuál de las dos ranuras es la que atraviesa el único fotón en su paso hacia la pantalla. Imaginemos que introducimos una nube de pequeñas partículas entre las ranuras y la pantalla. Un fotón que atraviesa una de las ranuras choca con una partícula y le da un determinado impulso que nos capacita para detectarla (Fig. 3-12.). Con tal que podamos establecer la posición de la partícula con una incertidumbre Δy menor que la mitad del espacio d entre las ranuras, podremos determinar cuál de las dos ranuras atravesó el fotón. Por tanto:

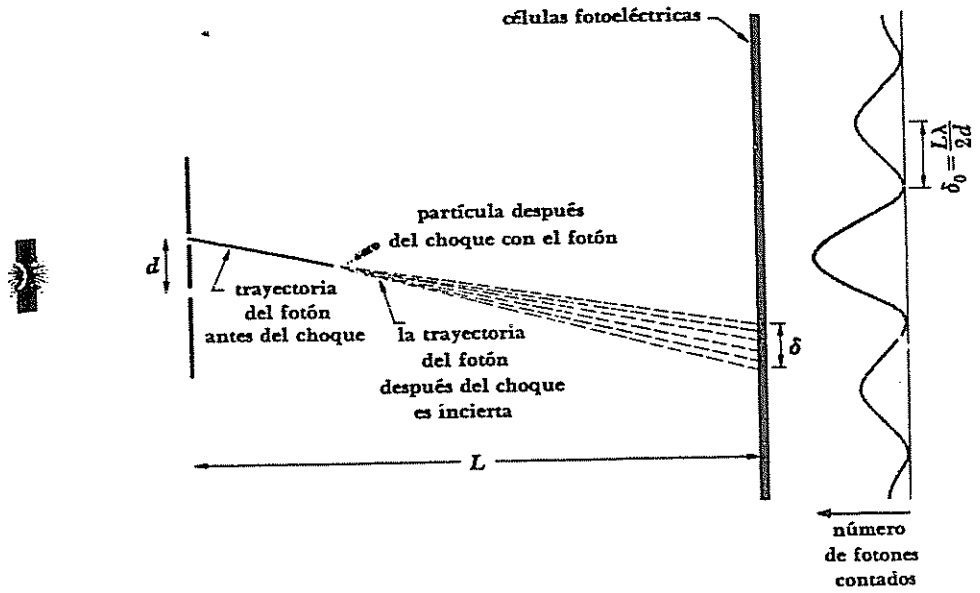


FIGURA 3-12 Experimento hipotético para determinar qué ranura ha atravesado cada fotón que contribuye a la formación de un patrón de interferencia de doble ranura.

$$\Delta y < \frac{d}{2}$$

Pero si podemos limitar la incertidumbre en la coordenada y de la partícula golpeada a Δy, la incertidumbre Δp_y en la componente y de su momentum es

3.27 $$\Delta p_y \geqslant \frac{\hbar}{\Delta y} > \frac{2\hbar}{d}$$

Como el choque presenta un cambio de Δp_y en el momentum de la partícula, debe haber ocurrido igualmente un cambio en el momentum del fotón. Un cambio de Δp_y en el momentum del fotón significa una desviación de

$$\delta = \frac{\Delta p_y}{p_x} L$$

en la localización de la pantalla contra la que choca el fotón; como $p_y \ll p$ (el ancho del modelo de difracción es pequeño comparado con la distancia L), $p_x \approx p$, y podemos escribir

www.elsolucionario.org

$$\delta = \frac{\Delta p_y}{p} L$$

El momentum del fotón se relaciona con la longitud de onda λ de la luz por la Ec. 3.1

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

y, por tanto

$$\delta = \frac{\Delta p_y \lambda L}{h}$$

De la Ec. 3.27 tenemos que $\Delta p_y > 2\hbar/d$, lo que significa que la desviación de la posición del fotón en la pantalla es

3.28 $$\delta = \frac{\lambda L}{\pi d}$$

De la óptica elemental sabemos que la distancia δ_0 entre un máximo (es decir, una "línea brillante") en el patrón de interferencia y un mínimo adyacente ("línea oscura") es

3.29 $$\delta_0 = \frac{\lambda L}{2d}$$

La distancia es casi la misma que la desviación mínima considerada al establecer cuál de las ranuras atraviesa cada fotón. Lo que de otra manera sería un patrón de líneas alternadas brillantes y oscuras se convierte en una imagen borrosa debido a las interacciones entre los fotones y las partículas utilizadas para trazar sus trayectorias. Por tanto, *no se puede observar interferencia*: el precio de determinar la trayectoria exacta de cada fotón es la destrucción del patrón de interferencia. Si nos interesamos en los aspectos ondulatorios del fenómeno, éstos se pueden demostrar; si nos interesamos en los aspectos corpusculares del mismo fenómeno, también se pueden demostrar, pero es imposible demostrar *ambos* aspectos en un experimento simultáneo. (Utilizar células fotoeléctricas para detectar un patrón de interferencia no es un experimento simultáneo en este sentido, porque no hay manera de que una célula fotoeléctrica pueda determinar a través de qué ranura ha pasado un fotón que choca contra ella.)

La pregunta original de cómo un fotón puede interferir consigo mismo resulta, por tanto, sin sentido. Es importante saber distinguir entre la pregunta legítima que no puede tener respuesta porque nuestros conocimientos actuales no son lo suficientemente detallados o avanzados para hacerle frente y una pregunta cuyo planteamiento está en contradicción con la experimentación. Las preguntas que tratan de separar los elementos de la dualidad onda-partícula caen en esta última clase en virtud del principio de incertidumbre, cuya validez empírica propia se ha establecido enteramente.

Problemas

1. Hallar la longitud de onda de De Broglie de un electrón cuya velocidad es 10^8 m/s.

2. Hallar la longitud de onda de De Broglie de un protón de 1 MeV.

3. Las dimensiones del núcleo son del orden de 10^{-14} m. *a*) Hallar la energía en eV de un electrón cuya longitud de onda de De Broglie es 10^{-15} m y que es, por tanto, capaz de revelar detalles de la estructura nuclear. *b*) Repetir el cálculo para un neutrón.

4. Los neutrones en equilibrio con la materia a la temperatura ambiente (300°K) tienen una energía media de $\frac{1}{25}$ eV, aproximadamente. (Estos neutrones se conocen normalmente con el nombre de "neutrones térmicos".) Determinar su longitud de onda de De Broglie.

5. Deducir una fórmula que exprese la longitud de onda de De Broglie (en Å) de un electrón, en función de la diferencia de potencial V (en volts) por medio del cual es acelerado.

6. Deducir una fórmula para la longitud de onda de De Broglie de una partícula en función de su energía cinética T y de su energía en reposo m_0c^2. Si $T \gg m_0c^2$, ¿cómo se compara la longitud de onda de la partícula con la longitud de onda de un fotón de la misma energía?

7. Considerar que las ondas electromagnéticas son un caso especial de las ondas de De Broglie. Demostrar entonces que los fotones se deben mover con la velocidad de onda c y que la masa en reposo del fotón es cero.

8. Calcular la longitud de onda de De Broglie de una partícula en movimiento en forma paralela al método original seguido por De Broglie. Considere una partícula de masa en reposo m_0 con una frecuencia característica de vibración ν_0 definida por la relación $h\nu_0 = m_0c^2$. La partícula viaja con velocidad v con relación a un observador. Con ayuda de la relatividad especial demostrar que el observador ve una onda progresiva cuya velocidad de fase es $w = c^2/v$ y cuya longitud de onda es h/mv, donde $m = m_0/\sqrt{1 - v^2/c^2}$.

9. La velocidad de las olas del océano es $\sqrt{g\lambda/2\pi}$, donde g es la aceleración debida a la gravedad. Hallar la velocidad de grupo de estas ondas.

10. La velocidad de las ondas en una superficie líquida es $\sqrt{2\pi S/\lambda\rho}$, donde S es la tensión superficial y ρ la densidad del líquido. Hallar la velocidad de grupo de estas ondas.

11. Se determinan al mismo tiempo la posición y el momentum de un electrón de 1 keV. Si la posición se determina con una precisión de 1 Å, ¿cuál es el porcentaje de incertidumbre en su momentum?

12. Un microscopio electrónico utiliza electrones de 40 keV. Determinar su poder de resolución, suponiendo que es igual a la longitud de onda de los electrones.

13. Comparar las incertidumbres en las velocidades de un electrón y de un protón confinados en una caja de 10 Å.

14. Las longitudes de onda se pueden determinar con precisión de 1 en 10^6. ¿Cuál es la incertidumbre en la posición de un fotón de rayos X de 1 Å cuando se mide simultáneamente su longitud de onda?

15. En un tiempo t determinado, una medición establece la posición de un electrón con una precisión de $\pm 10^{-11}$ m. Hallar la incertidumbre del momentum del electrón en t y, a partir de ésta, la incertidumbre en su posición 1 s más tarde. Si esta última incertidumbre no es $\pm 10^{-11}$ m, calcular la diferencia considerando a una partícula en movimiento como un paquete de ondas.

16. *a*) ¿Cuánto tiempo se necesita para medir la energía cinética de un electrón cuya velocidad es 10 m/s con una incertidumbre de no más del 0.1 por ciento? ¿Cuánto espacio habrá recorrido el electrón en este periodo? *b*) Efectuar los mismos cálculos para un insecto de 1 g cuya velocidad sea la misma. ¿Qué indican estos dos conjuntos de resultados?

17. Los átomos de un sólido poseen cierta *energía del punto cero* mínima aun a 0° K, mientras que esta restricción no se da para las moléculas de un gas ideal. Utilizar el principio de incertidumbre para explicar estas afirmaciones.

18. Comprobar que el principio de incertidumbre se puede expresar en la forma $\Delta L \, \Delta\theta \geqslant \hbar$, donde ΔL es la incertidumbre en el momentum angular de un cuerpo y $\Delta\theta$ es la incertidumbre en su posición angular [*Sugerencia:* considere que la partícula se mueve en un círculo describiendo una circunferencia.]

EL ATOMO 2

ESTRUCTURA ATOMICA 4

Desde la antigüedad se sospechaba que la materia, a pesar de su apariencia continua, poseía una estructura definida a nivel microscópico, más allá del alcance de nuestros sentidos. Esta sospecha no tomó cuerpo hasta hace aproximadamente siglo y medio. Desde entonces se ha demostrado plenamente la existencia de las partículas finales de la materia en sus formas comunes: los átomos y las moléculas. Sus constituyentes finales, electrones, protones y neutrones también se han estudiado e identificado. En este capítulo y en los siguientes se estudiará, principalmente, la estructura del átomo ya que de ella depende casi la totalidad de las propiedades de la materia que estructura el mundo que nos rodea.

Cada átomo consta de un pequeño núcleo formado por protones y neutrones, y tiene cierto número de electrones a cierta distancia de él. Es tentador pensar que los electrones rodean al núcleo como los planetas rodean al Sol, pero la teoría electromagnética clásica niega la posibilidad de órbitas electrónicas estables. En un esfuerzo para resolver esta paradoja, Niels Bohr aplicó, en 1913, conceptos cuánticos a la estructura atómica para obtener un modelo que, no obstante sus serios inconvenientes y la substitución subsecuente por una descripción mecánico-cuántica de mayor precisión y utilidad, sigue siendo una imagen conveniente del átomo. Aunque no es la tónica general de este libro el profundizar en hipótesis que se han descartado, estudiaremos la teoría de Bohr del átomo de hidrógeno, ya que ésta proporciona una transición válida hacia la teoría cuántica del átomo, que es más abstracta. Por esta razón, nuestra explicación de la teoría de Bohr difiere algo de la expuesta originalmente por Bohr, aunque todos los resultados sean idénticos.

www.elsolucionario.org

4.1 MODELOS ATOMICOS

A pesar de que los científicos del siglo XIX aceptaron la idea de que los elementos están formados por átomos, los conocimientos que había sobre ellos eran muy escasos. El descubrimiento del electrón como constituyente de los átomos proporcionó el primer indicio sobre la estructura atómica. Los electrones tienen carga negativa, mientras que los átomos son eléctricamente neutros: cada átomo debe tener, por lo tanto, la suficiente cantidad de carga positiva para equilibrar la negativa de sus electrones. Además, los electrones son miles de veces más ligeros que los átomos. Esto sugiere que los constituyentes cargados positivamente son los que dan lugar a casi toda la masa de los átomos. Cuando J. J. Thomson propuso, en 1898, que los átomos son esferas uniformes de materia cargada positivamente en la que se encuentran incluidos los electrones, su hipótesis pareció entonces perfectamente razonable. El modelo atómico de Thomson en forma de "panqué" —llamado así por su parecido con un "panqué" relleno de pasas— se representa en la Fig. 4-1. A pesar de su importancia, pasaron 13 años antes que se realizara una prueba experimental definitiva sobre el modelo del panqué. Estos ensayos, como veremos, condujeron al abandono de este modelo atómico sustituyéndolo por un concepto de estructura atómica, incomprensible a la luz de los conocimientos de la física clásica.

El método más directo para saber lo que hay dentro de un panqué es meter un dedo dentro de él. Parecido a esto es lo que hicieron Geiger y Marsden para conocer el interior del átomo. En su experimento clásico, realizado en 1911 bajo la sugerencia de Ernest Rutherford, emplearon como sonda las *partículas alfa* rápidas emitidas espontáneamente por algunos elementos radiactivos. Las partículas alfa son átomos de helio que han perdido dos electrones quedando con una carga de $+2e$; posteriormente examinaremos su origen y propiedades

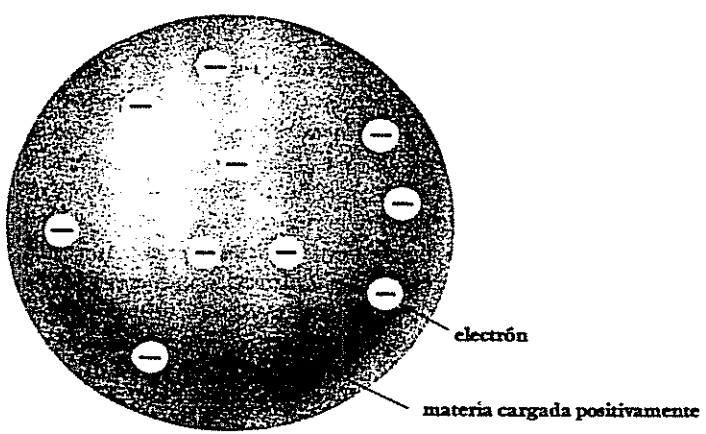


FIGURA 4-1 Modelo atómico de Thomson.

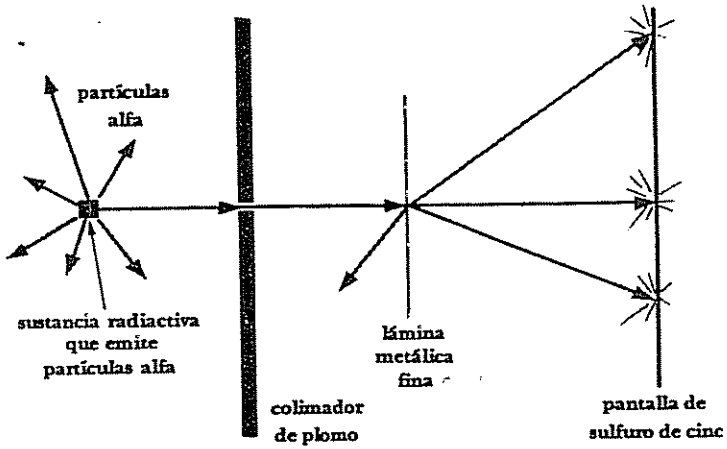


FIGURA 4-2 Experimento de dispersión de Rutherford.

con más detalle. Geiger y Marsden colocaron una muestra de una sustancia emisora de partículas alfa detrás de una pantalla de plomo que contenía un pequeño agujero, Fig. 4-2, de modo que se obtuviera un haz estrecho de partículas alfa. El haz se dirigió sobre una fina lámina de oro. Detrás de esta lámina colocaron una pantalla móvil de sulfuro de cinc que producía luminiscencia cuando una partícula alfa chocaba con ella. Se esperaba que la mayoría de las partículas alfa atravesarían la lámina de oro, mientras que el resto sufriría una ligera desviación. Este razonamiento es consecuencia del modelo atómico de Thomson en el que se suponía que las cargas se distribuían uniformemente en todo su volumen. Si el modelo de Thomson es exacto, sobre las partículas alfa que atraviesan la lámina metálica se ejercen solamente fuerzas eléctricas débiles y sus momenta iniciales son de valor suficiente para que puedan pasar la lámina con una desviación mínima de su trayectoria original.

Lo que Geiger y Marsden realmente observaron fue que, mientras que muchas partículas alfa salieron sin desviación, otras, sin embargo, sufrieron dispersión hasta ángulos muy grandes. Algunas se dispersaron en la dirección opuesta. Puesto que las partículas alfa son relativamente pesadas (una masa alrededor de 7 000 veces mayor que la del electrón) y como en el experimento se usaron partículas con velocidades muy altas, parece claro que las fuerzas eléctricas que intervinieron eran lo bastante fuertes como para poder producir desviaciones tan acentuadas. Para explicar estos resultados, Rutherford se vio obligado a describir al átomo como compuesto por un pequeño *núcleo* en el que se concentra la carga positiva y la mayor parte de la masa. Los electrones quedarían a una cierta distancia exterior (Fig. 4-3). Teniendo en cuenta que en el átomo hay espacios vacíos, es fácil explicarse porqué muchas partículas

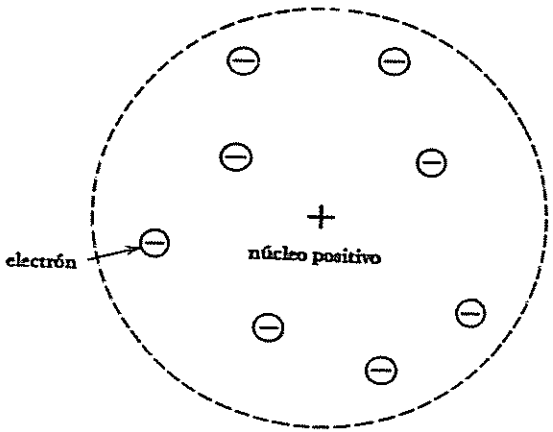


FIGURA 4-3 Modelo atómico de Rutherford.

alfa atraviesan la lámina sin sufrir desviación. Cuando una partícula alfa llega, por el contrario, a un núcleo, se encuentra con un campo eléctrico intenso y lo más probable es que sea dispersada a un ángulo considerable. Los electrones atómicos, por ser tan ligeros, no tienen efecto apreciable sobre el movimiento de las partículas alfa incidentes. Los cálculos numéricos de las intensidades del campo eléctrico en los modelos de Thomson y Rutherford acentúan las diferencias entre ellos. Si suponemos con Thomson que la carga positiva dentro de un átomo de oro se distribuye uniformemente en todo su volumen y se ignora totalmente el efecto de los electrones, la intensidad del campo eléctrico en la superficie del átomo (lugar donde es máxima) es aproximadamente 10^{13} V/m. Por otro lado, si consideramos con Rutherford que la carga positiva en un átomo de oro se encuentra concentrada en un pequeño núcleo situado en el centro, la intensidad del campo eléctrico es superior a 10^{21} V/m. Esto es, 10^8 veces mayor. Este campo eléctrico intenso puede desviar, y aun invertir, la dirección de una partícula alfa que llega a las proximidades de un núcleo. Por el contrario, el campo creado por el modelo atómico de Thomson no puede dar lugar a ello.

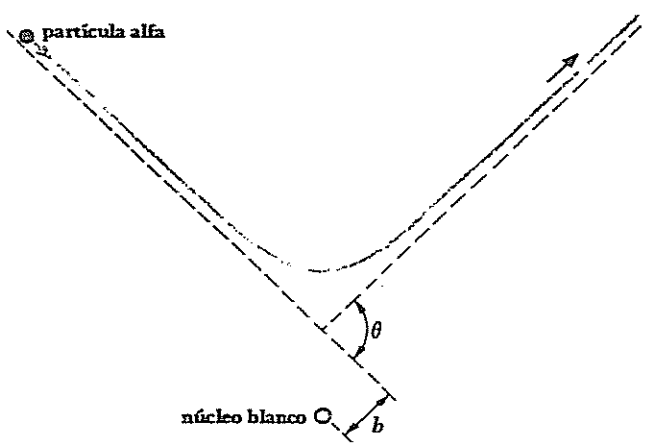
Los experimentos de Geiger y Marsden, así como los trabajos posteriores, dieron información sobre los núcleos de los átomos de las láminas metálicas que hacían de blanco. La desviación de las partículas alfa, cuando pasan por las proximidades de un núcleo, depende de la magnitud de la carga del núcleo. De este modo, comparando la dispersión relativa de las partículas alfa por distintas láminas metálicas, se tiene un método para estimar la carga del núcleo de los distintos átomos que intervienen. Se encontró que todos los átomos de un mismo elemento tienen la misma carga nuclear y que esta carga aumenta de elemento en elemento en el sistema periódico. La carga nuclear resultó ser siempre un múltiplo de $+e$; el número de cargas positivas en el

núcleo de un elemento se conoce con el nombre de *número atómico*. Actualmente sabemos que los protones, —cada uno con una carga $+e$— son la causa de la carga del núcleo, y que el número atómico de un elemento es el número de protones que hay en él.

4.2 DISPERSION DE PARTICULAS ALFA

Rutherford obtuvo una fórmula para describir la dispersión de las partículas alfa a través de láminas metálicas sobre la base de su modelo atómico, que concordaba con los resultados experimentales. La deducción de esta fórmula sirve al mismo tiempo para ilustrar la aplicación de leyes fundamentales de la física a un nuevo sistema e introducir ciertas nociones, como la de *sección transversal* de una interacción, que son de gran importancia en otros aspectos de la física moderna.

Rutherford empezó suponiendo que la partícula alfa y el núcleo son tan pequeños que se pueden considerar como masas y cargas puntuales. Igualmente admitió que sólo actúa la fuerza electrostática de repulsión (la partícula y el núcleo están cargados positivamente) entre ellos, y que el núcleo, debido a su masa comparativamente mucho mayor, no se mueve en su interacción con la partícula alfa. Puesto que la variación de la fuerza electrostática es función de $1/r^2$, siendo r la separación instantánea entre la partícula alfa y el núcleo, la trayectoria de la partícula alfa es una hipérbola que tiene el núcleo en el foco exterior (Fig. 4-4). El *parámetro de impacto* b es



θ = ángulo de dispersión
b = parámetro de impacto

FIGURA 4-4 Dispersión de Rutherford.

la distancia mínima a la que la partícula alfa se aproximaría al núcleo si no existieran fuerzas entre ellos; el *ángulo de dispersión* θ es el que se forma por las direcciones asintóticas de aproximación y retroceso de la partícula alfa. El primer paso es encontrar una relación entre b y θ.

Como consecuencia del impulso $\int \mathbf{F}\,dt$ dado por el núcleo, el momentum de la partícula alfa varía por $\Delta\mathbf{p}$ desde el valor inicial $\mathbf{p}_1$ hasta el valor final $\mathbf{p}_2$. Esto es

$$\Delta\mathbf{p} = \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1 = \int \mathbf{F}\,dt \tag{4.1}$$

Debido a que el núcleo permanece estacionario durante el paso de la partícula alfa, la energía de esta, por hipótesis, se mantiene constante; por tanto, la *magnitud* de su momentum también permanece constante, y

$$p_1 = p_2 = mv$$

Aquí v es la velocidad de la partícula alfa lejos del núcleo. De acuerdo con la ley de senos, en la Fig. 4-5 se ve que

$$\frac{\Delta p}{\operatorname{sen}\theta} = \frac{mv}{\operatorname{sen}\dfrac{(\pi-\theta)}{2}}$$

Y puesto que

$$\operatorname{sen}\frac{1}{2}(\pi-\theta) = \cos\frac{\theta}{2}$$

y

$$\operatorname{sen}\theta = 2\operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}$$

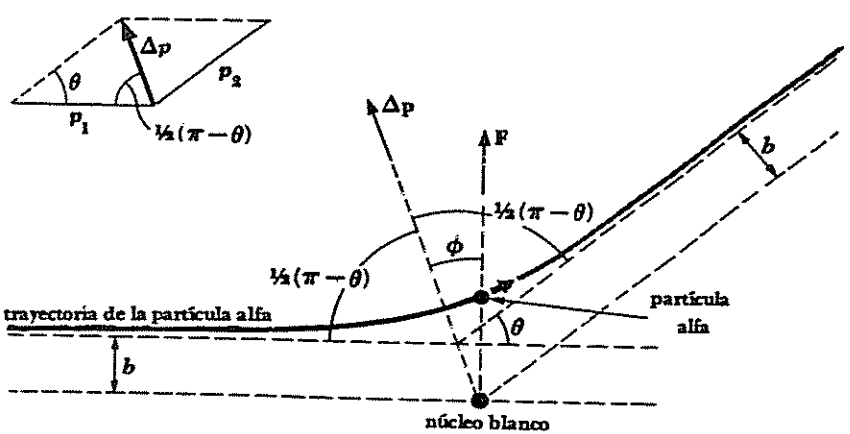


FIGURA 4-5 Relaciones geométricas en la dispersión de Rutherford.

tenemos que la variación del momentum es

$$\Delta p = 2mv\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} \tag{4.2}$$

Como el impulso $\int \mathbf{F}\,dt$ es en la misma dirección que la variación del momentum $\Delta\mathbf{p}$, su magnitud es

$$\int F\,dt = \int F\cos\phi\,dt \tag{4.3}$$

donde ϕ es el ángulo instantáneo entre $\mathbf{F}$ y $\Delta\mathbf{p}$ a lo largo del recorrido de la partícula alfa. Sustituyendo las Ecs. 4.2 y 4.3 en 4.1, tenemos

$$2mv\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} = \int_0^\infty F\cos\phi\,dt$$

Al hacer el cambio de variable de t a ϕ, notamos que los límites de integración son $-\frac{1}{2}(\pi-\theta)$ y $+\frac{1}{2}(\pi-\theta)$, correspondientes al valor de ϕ para $t=0$ y $t=\infty$, y de este modo

$$2mv\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} = \int_{-(\pi-\theta)/2}^{+(\pi-\theta)/2} F\cos\phi\,\frac{dt}{d\phi}\,d\phi \tag{4.4}$$

El término $d\phi/dt$ es la velocidad angular ω de la partícula alfa alrededor del núcleo (Fig. 4.5). La fuerza electrostática ejercida por el núcleo sobre la partícula alfa actúa a lo largo del radio vector que los une. De este modo, no hay torca sobre la partícula alfa y su momentum angular $m\omega r^2$ es constante

$$\begin{aligned} m\omega r^2 &= \text{constante} \\ &= mr^2\frac{d\phi}{dt} \\ &= mvb \end{aligned}$$

por lo que

$$\frac{dt}{d\phi} = \frac{r^2}{vb}$$

Sustituyendo esta expresión en la Ec. 4.4, tenemos

$$2mv^2b\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} = \int_{-(\pi-\theta)/2}^{+(\pi-\theta)/2} Fr^2\cos\phi\,d\phi \tag{4.5}$$

Recordemos que F es la fuerza electrostática que ejerce el núcleo sobre la partícula alfa. La carga del núcleo correspondiente al número atómico Z es Ze y la de la partícula alfa es $2e$. Por tanto,

$$F = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2Ze^2}{r^2}$$

www.elsolucionario.org

y

$$\frac{4\pi\varepsilon_0 mv^2 b}{Ze^2}\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} = \int_{-(\pi-\theta)/2}^{+(\pi-\theta)/2} \cos\phi\, d\phi$$

$$= 2\cos\frac{\theta}{2}$$

El ángulo de dispersión θ está relacionado con el parámetro de impacto b mediante la ecuación

$$\cot\frac{\theta}{2} = \frac{2\pi\varepsilon_0 mv^2}{Ze^2} b$$

Es mejor determinar la energía T de la partícula alfa en lugar de su masa y su velocidad por separado. Haciendo esta sustitución

4.6 $$\cot\frac{\theta}{2} = \frac{4\pi\varepsilon_0 T}{Ze^2}\, b$$

La Fig. 4-6 es una representación esquemática de la Ec. 4.6. Es evidente que al aumentar b, θ disminuye rápidamente. Es necesaria una trayectoria muy próxima para que tenga lugar una desviación apreciable.

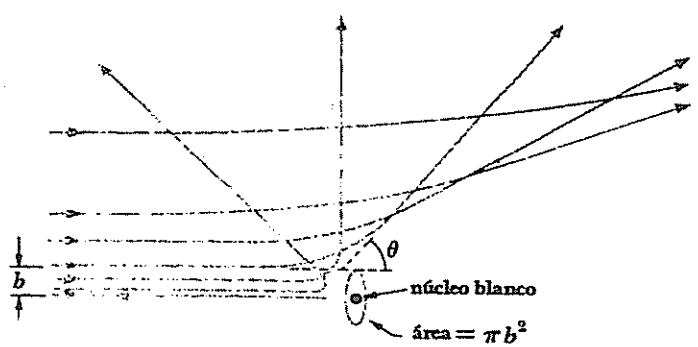


FIGURA 4-6 El ángulo de dispersión disminuye al aumentar el parámetro de impacto.

4.3 LA FORMULA DE RUTHERFORD DE LA DISPERSION

La Ec. 4.6 no se puede comprobar experimentalmente ya que no hay manera de poder medir el parámetro de impacto que corresponde a un ángulo de dispersión determinado. Es preciso emplear un camino indirecto. El primer paso es considerar que toda partícula alfa que se aproxima a un núcleo con un parámetro de impacto, que puede ir desde 0 hasta b, se dispersará según un ángulo igual o mayor que θ; θ viene dado en función de b por la Ec. 4.6. Esto significa que una partícula alfa que tiene inicialmente cualquier dirección dentro del área πb^2 alrededor del núcleo, se dispersará con un ángulo igual o mayor que θ (Fig. 4-6). El área πb^2 recibe el nombre de *sección transversal* de la interacción. Su símbolo es σ. Por tanto,

4.7 $$\sigma = \pi b^2$$

Hay que tener siempre en cuenta que la partícula alfa incidente sufre dispersión antes de llegar muy cerca del núcleo y que, por tanto, no es necesario que su trayectoria quede contenida en la distancia b del mismo.

Consideremos una lámina metálica de espesor t que contenga n átomos por unidad de volumen. El número de núcleos blanco por unidad de área es nt. Por tanto, un haz incidente de partículas alfa en un área A encuentra ntA núcleos. La sección transversal global, para dispersiones de valor igual o superior a θ, es igual al número de núcleos blanco ntA multiplicado por la sección transversal σ para la dispersión de cada núcleo; esto es, $nt A\sigma$. Por tanto, la fracción f de partículas alfa dispersadas con un valor igual o mayor de θ es la relación entre la sección global $ntA\sigma$ y el área total A. Esto es,

$$f = \frac{\text{partículas alfa dispersadas en } \theta \text{ o más}}{\text{partículas alfa incidentes}}$$

$$= \frac{\text{sección transversal global}}{\text{área blanco}}$$

$$= \frac{ntA\sigma}{A}$$

$$= nt\pi b^2$$

Sustituyendo el valor de b de la Ec. 4.6,

4.8 $$f = \pi nt\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 T}\right)^2 \cot^2\frac{\theta}{2}$$

En esta deducción se ha supuesto que la lámina es lo suficientemente fina como para que las secciones transversales de los núcleos vecinos no se superpongan y que una partícula alfa deba su desviación solamente al encuentro con un núcleo.

Utilicemos la ecuación 4.8 para determinar qué fracción de un haz de partículas alfa de 7.7 MeV se dispersa con un ángulo mayor de 45° cuando incide sobre una lámina de oro de 3×10^{-7} m de espesor. (Estos valores corresponden a la energía de las partículas alfa y al espesor de la lámina utilizada por Geiger y Marsden. A modo de comparación, pensemos que un cabello humano tiene un diámetro aproximado de 10^{-4} m.) Para empezar,

podemos hallar el número n de átomos de oro por unidad de volumen de la lámina a partir de la relación

$$\frac{\text{átomos}}{\text{volumen}} = \frac{(\text{átomos/kmol}) \times (\text{masa/volumen})}{\text{masa/kmol}}$$

$$n = \frac{N_0 \rho}{w}$$

donde N_0 es el número de Avogadro, ρ la densidad del oro y w su peso atómico. Como $N_0 = 6.03 \times 10^{26}$ átomos/kmol, $\rho = 1.93 \times 10^4$ kg/m^3, y w 197, tenemos

$$n = \frac{6.03 \times 10^{26} \text{ átomos/kmol} \times 1.93 \times 10^4 \text{ kg/m}^3}{197 \text{ kg/kmol}}$$

$$= 5.91 \times 10^{28} \text{ átomos/m}^3$$

El número atómico Z del oro es 79. Una energía cinética de 7.7 MeV es igual a 1.23×10^{-12} J, y $\theta = 45°$; de estos datos tenemos que

$$f = 7 \times 10^{-5}$$

Esta es la fracción de partículas alfa incidentes que se dispersan con un ángulo igual o mayor a 45° — ¡solamente un 0.007%!. Una lámina de este espesor es, por tanto, completamente transparente a las partículas alfa.

En un experimento real, un detector midió las partículas alfa dispersadas entre θ y $\theta + d\theta$ (Fig. 4-7). La fracción de partículas alfa incidentes dispersadas se calcula diferenciando la Ec. 4.8 con respecto a θ, dando

$$4.9 \qquad df = -\pi nt\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 T}\right)^2 \cot\frac{\theta}{2}\csc^2\frac{\theta}{2}\,d\theta$$

(El signo menos indica que f disminuye al aumentar θ.) Para realizar el experimento se colocó una pantalla fluorescente a una distancia r de la lámina y las partículas alfa dispersadas se detectaron por medio del centelleo que producían. Las partículas dispersadas entre θ y $\theta + d\theta$ forman una zona esférica de radio r de una anchura $rd\theta$. El radio de esta zona es r sen θ; y por tanto, el área ds de la pantalla barrida por estas partículas es

$$dS = (2\pi r \operatorname{sen}\theta)(rd\theta)$$

$$= 2\pi r^2 \operatorname{sen}\theta\, d\theta$$

$$= 4\pi r^2 \operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\,d\theta$$

Si durante el experimento un número total de N_i partículas alfa llegan a la lámina, el número de las dispersadas entre θ y $\theta + d\theta$ es $N_i\,df$. El número $N(\theta)$, que es el número de las que inciden en la pantalla por unidad de área, es el que realmente se mide, y tiene un valor

$$N(\theta) = \frac{N_i\,|df|}{dS}$$

$$= \frac{N_i \pi nt\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 T}\right)^2 \cot\frac{\theta}{2}\csc^2\frac{\theta}{2}\,d\theta}{4\pi r^2 \operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\,d\theta}$$

$$4.10 \qquad N(\theta) = \frac{N_i nt Z^2 e^4}{(8\pi\varepsilon_0)^2 r^2 T^2 \operatorname{sen}^4(\theta/2)}$$

Fórmula de dispersión de Rutherford

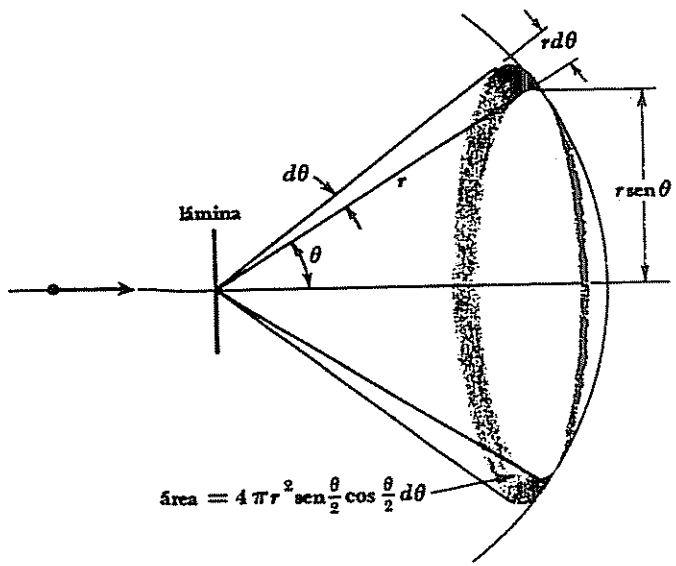


FIGURA 4-7 En el experimento de Rutherford se detectan las partículas que han sido dispersadas entre θ y $\theta + d\theta$.

La Ec. 4.10 es la *fórmula de dispersión de Rutherford.*

Según esta fórmula, el número de partículas por unidad de área que llegan a la pantalla fluorescente, colocada a una distancia r de la lámina de dispersión, sería directamente proporcional al espesor t de la lámina, al número de átomos por unidad de volumen de la lámina y al cuadrado del número atómico Z de la misma. Por otro lado, sería inversamente proporcional al cuadrado de la energía cinética T de las partículas alfa y al sen$^4(\theta/2)$, siendo θ el ángulo de dispersión. Estas predicciones están de acuerdo con las mediciones ya citadas de Geiger y Marsden y llevaron a Rutherford a concluir que estas suposiciones, primeras entre las hipótesis del núcleo atómico, eran correctas. Rutherford se acreditó así como "descubridor" del núcleo. La Fig. 4-8 muestra cómo $N(\theta)$ varía con θ.

4.4 DIMENSIONES NUCLEARES

Cuando se dice que los datos experimentales sobre la dispersión de partículas alfa por una lámina confirman nuestras suposiciones de que el núcleo atómico lo constituyen partículas puntiformes, lo que se quiere decir es que sus dimensiones son insignificantes comparadas con la distancia mínima a la que la partícula alfa se aproxima al núcleo. La fórmula de dispersión de Rutherford nos permite así determinar un límite superior para las dimensiones nucleares. Calculemos la distancia r_0 más próxima al núcleo que puede alcanzar la partícula con mayor energía de las empleadas en los experimentos anteriores. Una partícula alfa alcanzará el valor más pequeño de r_0 cuando su parámetro de impacto sea $b = 0$, correspondiente a una aproximación frontal seguida de una

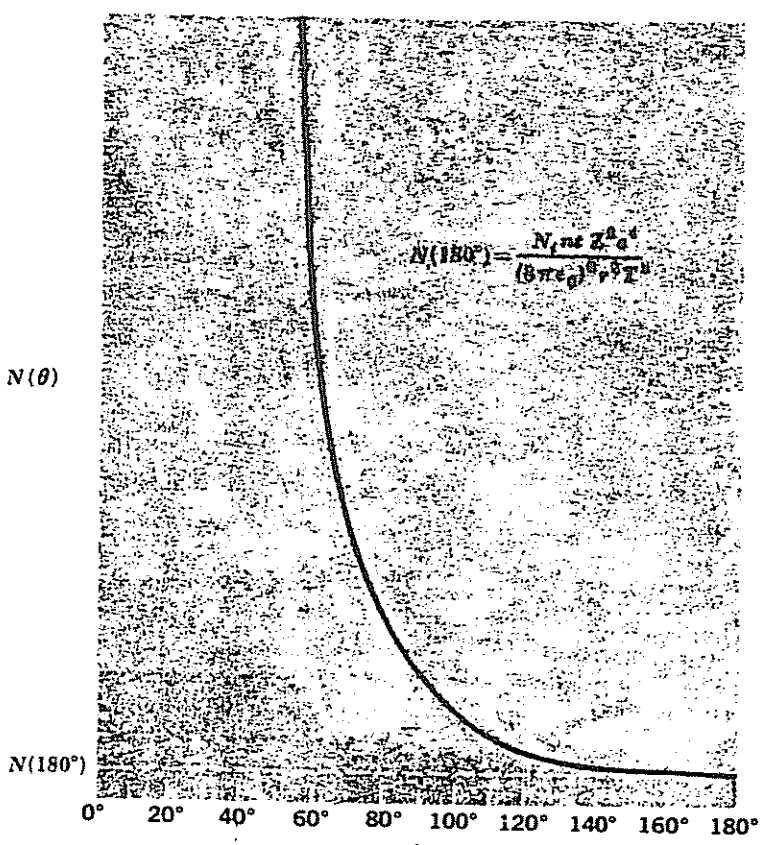


FIGURA 4-8 Dispersión de Rutherford.

dispersión a 180°. En este momento, la energía cinética inicial T de la partícula se transforma totalmente en energía potencial electrostática, y así

$$T = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2Ze^2}{r_0} \tag{4.11}$$

puesto que la carga de la partícula alfa es $2e$ y la del núcleo Ze. Entonces

$$r_0 = \frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 T}$$

El máximo valor de T encontrado en una partícula alfa de origen natural es 7.7 MeV, que es

$$7.7 \times 10^6 \text{ eV} \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ J/eV} = 1.2 \times 10^{-12} \text{ J}$$

Ya que $1/4\pi\varepsilon_0 = 9 \times 10^9 \text{ N-m}^2/\text{C}^2$

$$r_0 = \frac{2 \times 9 \times 10^9 \text{ N-m}^2/\text{C}^2 \times (1.6 \times 10^{-19} \text{ C})^2 Z}{1.2 \times 10^{-12} \text{ J}}$$
$$= 3.8 \times 10^{-16} Z \text{ m}$$

El número atómico del oro, un material común usado como lámina, es $Z = 79$, de modo que

$$r_0(\text{Au}) = 3.0 \times 10^{-14} \text{ m}$$

El radio del núcleo de oro es, por tanto, menor que 3.0×10^{-14} m; esto es $1/10{,}000$ del radio del átomo en conjunto.

En los últimos años se ha conseguido obtener, por aceleración artificial, partículas alfa con energías muy superiores a los 7.7 MeV y se ha encontrado que la fórmula de dispersión de Rutherford no concuerda en último término con la experiencia. En el Cap. 11 se examinarán estas experiencias, así como la información que proporcionan sobre las dimensiones reales del núcleo.

4.5 LAS ORBITAS ELECTRONICAS

El modelo atómico de Rutherford, tan ampliamente confirmado por la experimentación, afirma la existencia de un pequeño núcleo cargado positivamente, con una masa muy pesada, y rodeado, a una distancia relativamente grande, de la suficiente cantidad de electrones para dar a la totalidad del átomo neutralidad eléctrica. Thomson supuso en su modelo atómico que los electrones estaban embebidos en la materia cargada positivamente del núcleo, de modo que no podían moverse. Sin embargo, en el modelo atómico de Rutherford, los electrones no pueden estar inmóviles ya que no existe nada que sea capaz de mantenerlos en su sitio frente a la atracción de la fuerza electrostática del núcleo. Por el contrario, si los electrones están en

www.elsolucionario.org

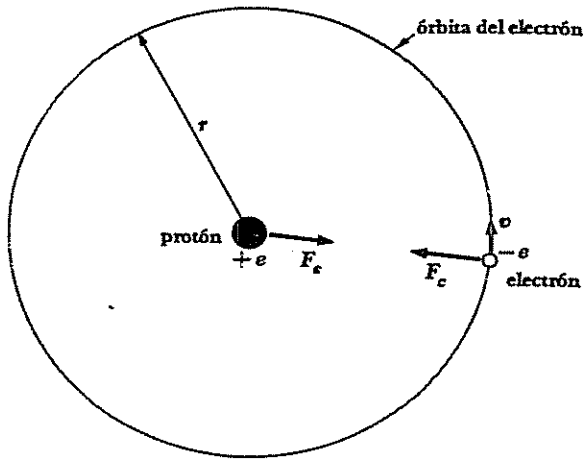


FIGURA 4-9 Equilibrio de fuerzas en el átomo de hidrógeno.

movimiento alrededor del núcleo, es posible la existencia de órbitas dinámicas estables, parecidas a las que forman los planetas alrededor del Sol (Fig. 4-9).

Examinemos la dinámica clásica del átomo de hidrógeno, que por tener un solo electrón es el más sencillo de todos. Se supone, por conveniencia, que la órbita electrónica es circular, aunque tambien se podría pensar, sin que hubiese nada en contra, que fuera elíptica. La fuerza centrípeta

$$F_c = \frac{mv^2}{r}$$

que mantiene al electrón a una distancia r del núcleo es contrarrestada por la fuerza electrostática

$$F_e = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2}$$

entre ellos, y la condición de estabilidad para la órbita es

$$F_c = F_e$$

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} \qquad 4.12$$

La velocidad del electrón v está, por tanto, relacionada con el radio r de la órbita mediante la fórmula

$$v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0 mr}} \qquad 4.13$$

La energía total E del electrón en un átomo de hidrógeno es la suma de sus energías cinética

$$T = \tfrac{1}{2}mv^2$$

y potencial

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

(El signo menos significa que la fuerza sobre el electrón es en el sentido $-r$.) Por tanto,

$$E = T + V$$
$$= \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

Sustituyendo a v por el valor dado en la Ec. 4.12,

$$E = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$
$$= -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} \qquad 4.14$$

La energía total de un electrón en el átomo es negativa; esto es necesario para que el electrón permanezca unido al núcleo. Si E fuera mayor que 0, el electrón tendría demasiada energía para permanecer en una órbita cerrada alrededor del núcleo.

Los datos experimentales indican que son necesarios 13.6 eV para descomponer a un átomo de hidrógeno en un protón y un electrón; esto es, su energía de enlace E es -13.6 eV. Puesto que $13.6\ \text{eV} = 2.2 \times 10^{-18}$ J, se puede calcular el radio de órbita del electrón en el átomo de hidrógeno a partir de la Ec. 4.14

$$r = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 E}$$
$$= -\frac{(1.6 \times 10^{-19}\ \text{C})^2}{8\pi \times 8.85 \times 10^{-12}\ \text{F/m} \times (-2.2 \times 10^{-18}\ \text{J})}$$
$$= 5.3 \times 10^{-11}\ \text{m}$$

Un radio atómico de este orden concuerda con los resultados obtenidos por otros medios.

La hipótesis que acabamos de exponer es una aplicación directa de las leyes de Newton, de movimiento y de la fuerza eléctrica de Coulomb —ambas, pilares básicos de la física clásica—, y está de acuerdo con la observación experimental de que los átomos son estables. Sin embargo, no está de acuerdo con la teoría electromagnética —otro pilar básico de la física clásica—, ya que ésta dice que toda carga eléctrica acelerada irradia energía en forma de ondas electromagnéticas. Un electrón que sigue una trayectoria circular está

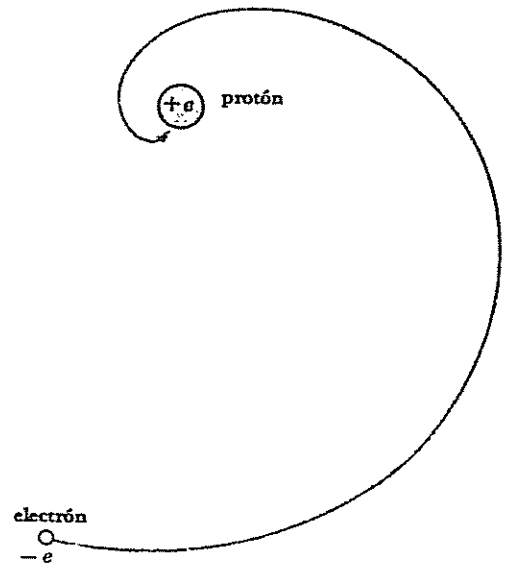


FIGURA 4-10 Según la física clásica, un electrón atómico seguiría rápidamente una espiral hacia el núcleo al radiar energía debido a su aceleración.

acelerado y, por tanto, perdería energía continuamente, yendo a caer en espiral sobre el núcleo (Fig. 4.10). Siempre que se ha ensayado directamente con electrones, las predicciones de la teoría electromagnética han concordado con la experiencia; sin embargo, los átomos son dinámicamente estables. Esta contradicción significa únicamente una cosa: las leyes físicas que rigen en el mundo macroscópico no se cumplen en el mundo microscópico del átomo.

El motivo del fracaso de la física clásica para dar una explicación de la estructura atómica está en que ella se acerca a la naturaleza en función de conceptos abstractos, tales como partículas "puras" y ondas "puras". Como se vio en los dos capítulos anteriores, las partículas y las ondas tienen muchas propiedades en común aunque, debido a la pequeñez de la constante de Planck, la dualidad onda-corpúsculo no sea perceptible en el mundo macroscópico. La validez de la física clásica disminuye cuando disminuye la escala del fenómeno estudiado. Por tanto, si se quiere comprender bien al átomo, es necesario comprender completamente el comportamiento corpuscular de las ondas y el comportamiento ondulatorio de las partículas. En el resto de este capítulo se verá cómo el modelo atómico de Bohr, que combina las ideas clásicas y modernas, resuelve parte de estas divergencias. Hasta que consideremos al átomo desde el punto de vista de la mecánica cuántica, que no compromete las nociones intuitivas adquiridas en la experiencia de la vida diaria, se tendrá una teoría acertada del átomo.

En este momento se plantea un problema interesante. En la deducción de la fórmula de dispersión de Rutherford se utilizaron las mismas leyes de física que

más tarde llevaron al fracaso cuando se aplicaron al estudio de la estabilidad del átomo. ¿No es, por tanto, posible, o al menos probable, que la fórmula no sea correcta y que el átomo en realidad no se parezca al modelo de Rutherford, constituido por un núcleo central rodeado de electrones a cierta distancia? Este problema no es trivial y, en cierto modo, es una coincidencia curiosa que el estudio mecánico-cuántico de la dispersión de partículas alfa a través de una lámina metálica dé precisamente la misma fórmula que la que obtuvo Rutherford. Para comprobar que un cálculo clásico debería ser por lo menos aproximadamente correcto, notamos que la longitud de onda de De Broglie de una partícula alfa cuya velocidad es 2×10^7 m/s es

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6.63 \times 10^{-34}\ \text{J-s}}{6.6 \times 10^{-27}\ \text{kg} \times 2 \times 10^7\ \text{m/s}}$$
$$= 5 \times 10^{-15}\ \text{m}$$

Como vimos en la Sec.4.4, lo más cerca que una partícula alfa con esta longitud de onda se puede aproximar a un núcleo de oro es 3×10^{-14} m, que es igual a 6 longitudes de onda de De Broglie y; por tanto, en la interacción es razonable considerar a la partícula alfa como una partícula clásica. En consecuencia, se puede pensar que es correcto el modelo de Rutherford, aunque la dinámica de los electrones atómicos, que es completamente diferente, requiera una aproximación más fina, no clásica.

4.6 ESPECTROS ATOMICOS

La capacidad de la teoría atómica de Bohr para explicar el origen de las líneas espectrales se cuenta como uno de sus más espectaculares logros. Por este motivo, es apropiado iniciar su exposición con un estudio de los espectros atómicos.

Anteriormente vimos que todo cuerpo sólido calentado emite radiaciones en las que se presentan todo tipo de longitudes de onda, aunque con diferentes intensidades. En el Cap.9 se verá cómo los espectros observados de esta radiación se pueden explicar con base en la teoría cuántica de la luz, independientemente de los detalles mismos del proceso de radiación y de la naturaleza del sólido. De ello se deduce que cuando un sólido se calienta hasta la incandescencia, podemos presenciar el comportamiento conjunto de una colectividad de átomos en vez del comportamiento individual de los átomos de un elemento determinado.

Por otro lado, los átomos o moléculas de un gas enrarecido se encuentran tan separados unos de otros que las únicas interacciones entre ellos se deben solamente a choques fortuitos. En estas circunstancias, se esperaría que cualquier radiación emitida sea característica de los átomos o moléculas presentes. Esta suposición se ha comprobado experimentalmente. Cuando se "excita" de la manera adecuada un gas o un vapor atómico a una presión

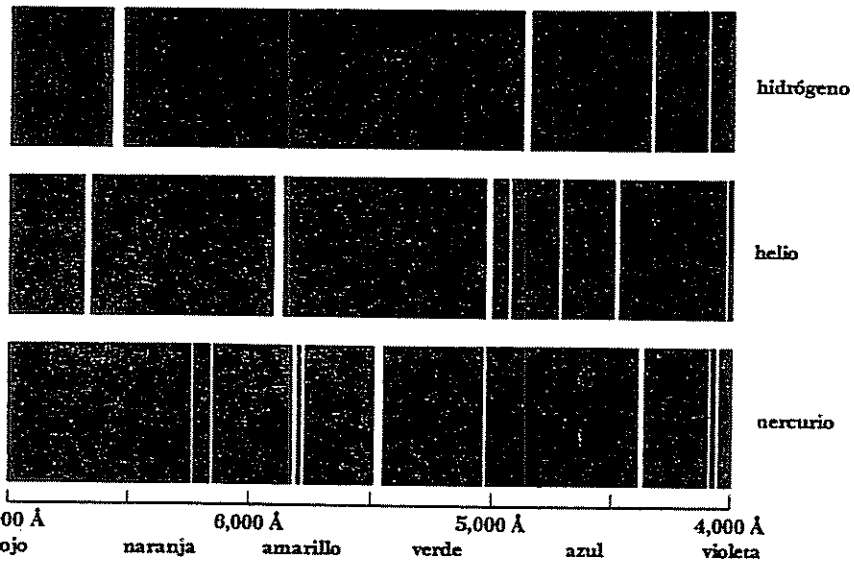


FIGURA 4-11 Porciones de los espectros de emisión del hidrógeno, del helio y del mercurio.

ligeramente inferior a la atmosférica —normalmente mediante el paso de una corriente eléctrica— emite un espectro de radiación que contiene sólo determinadas longitudes de onda. La Fig. 4-11 muestra los espectros atómicos de varios elementos, denominados *espectros de líneas de emisión*. Cada elemento da lugar a un espectro de líneas único cuando se excita en fase gaseosa. La espectroscopía es así un medio de suma utilidad para analizar la composición de una sustancia desconocida.

El espectro de un gas o vapor molecular excitado contiene *bandas* que están formadas por muchas líneas distintas entre sí, pero muy próximas unas a otras (Fig. 4-12). Las bandas deben su origen a las rotaciones y vibraciones de los átomos en una molécula electrónicamente excitada. Su interpretación se hará en el próximo capítulo.

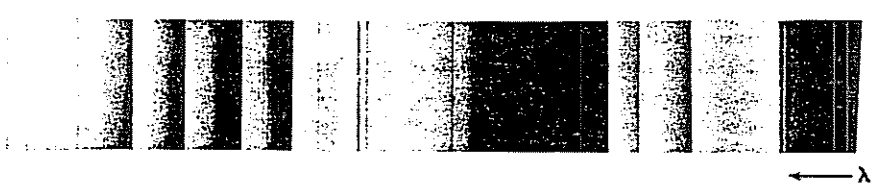


FIGURA 4-12 Parte del espectro de bandas de PN.

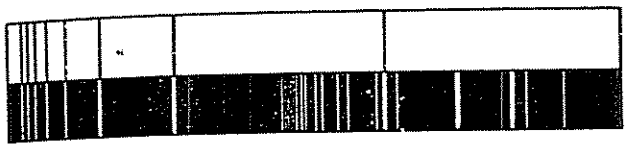


FIGURA 4-13 Las líneas oscuras en el espectro de absorción de un elemento corresponden a las líneas claras en su espectro de emisión.

Cuando la luz blanca pasa a través de un gas, éste absorbe luz de alguna de las longitudes de onda presentes en su espectro de emisión. El *espectro de líneas de absorción* resultante está formado por un fondo claro sobre el que se ven líneas oscuras correspondientes a las longitudes de onda ausentes (Fig. 4-13); los espectros de emisión están formados por líneas claras sobre fondo oscuro. Las líneas oscuras de Fraunhofer del espectro solar se deben a que la parte luminosa del Sol, cuya radiación es casi exactamente la que predice la teoría para un cuerpo calentado a 5800° K, está rodeado de una capa de gas más frío que absorbe luz solamente de determinadas longitudes de onda.

A finales de siglo XIX se descubrió que las longitudes de onda presentes en un espectro atómico caen dentro de determinados conjuntos llamados *series espectrales*. Las longitudes de onda en cada serie se pueden establecer por una fórmula empírica simple, existiendo una notable similitud entre las fórmulas de las diversas series que abarca al espectro completo de un elemento. La primera de estas series espectrales la encontró J. J. Balmer, en 1885, en el curso de un estudio sobre la parte visible del espectro del hidrógeno. La Fig. 4-14 muestra la *serie de Balmer*. La línea de mayor longitud de onda 6,563 Å, se representa por H_α, la siguiente, de longitud de onda 4,863 Å, por H_β, y así sucesivamente. Al disminuir la longitud de onda, las líneas se aproximan unas a otras cada vez más y su intensidad de hace más débil, hasta que se alcanza el *límite de la serie* en 3,646 Å, más allá del cual no hay líneas sino un tenue

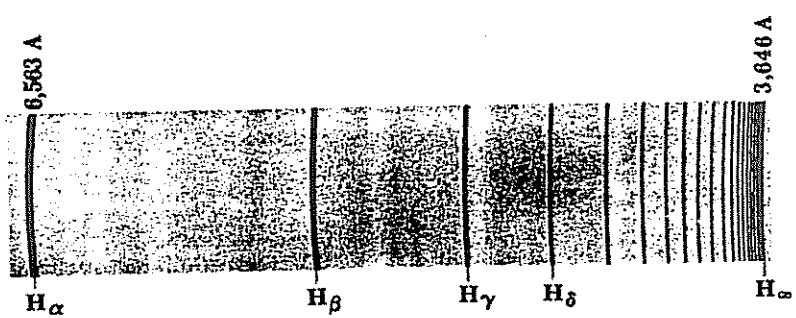


FIGURA 4-14 Serie de Balmer del hidrógeno.

www.elsolucionario.org

espectro continuo. La fórmula de Balmer para las longitudes de onda de esta serie es

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 3, 4, 5, \ldots \qquad \text{Balmer} \tag{4.15}$$

La cantidad R, conocida como *constante de Rydberg*, tiene el valor

$$R = 1.097 \times 10^7\ \text{m}^{-1}$$
$$= 1.097 \times 10^{-3}\ \text{Å}^{-1}$$

La línea H_α corresponde a $n = 3$, la H_β a $n = 4$ y así sucesivamente. El límite de la serie corresponde a $n = \infty$, de modo que se presenta para una longitud de onda de $4/R$, de acuerdo con la experiencia.

La serie de Balmer contiene solamente longitudes de onda en la parte visible del espectro de hidrógeno. Las líneas espectrales del hidrógeno en las regiones del ultravioleta y del infrarrojo caen dentro de otras series. En el ultravioleta, la *serie de Lyman* contiene las longitudes de onda dadas por la fórmula

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 2, 3, 4, \ldots \qquad \text{Lyman} \tag{4.16}$$

En el infrarrojo, se han encontrado tres series espectrales con líneas cuyas longitudes de onda vienen dadas por las fórmulas

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 4, 5, 6, \ldots \qquad \text{Paschen} \tag{4.17}$$

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 5, 6, 7, \ldots \qquad \text{Brackett} \tag{4.18}$$

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 6, 7, 8, \ldots \qquad \text{Pfund} \tag{4.19}$$

Estas series espectrales del hidrógeno se representan en función de la longitud de onda en la Fig. 4-15; la serie de Brackett se superpone a la serie de Paschen y a la serie de Pfund. El valor de R es el mismo en las Ecs. de la 4.15 a la 4.19.

La existencia de regularidades tan notables en el espectro del hidrógeno, lo mismo que en el espectro de elementos más complejos, supone una prueba definitiva para cualquier teoría de la estructura atómica.

4.7 EL ATOMO DE BOHR

En la Sec. 4.5 vimos que los principios de la física clásica son incompatibles con la estabilidad que se observa en el átomo de hidrógeno. En este átomo, el electrón se ve obligado a girar alrededor del núcleo para evitar caer sobre él y, sin embargo, debe irradiar energía electromagnética de modo continuo.

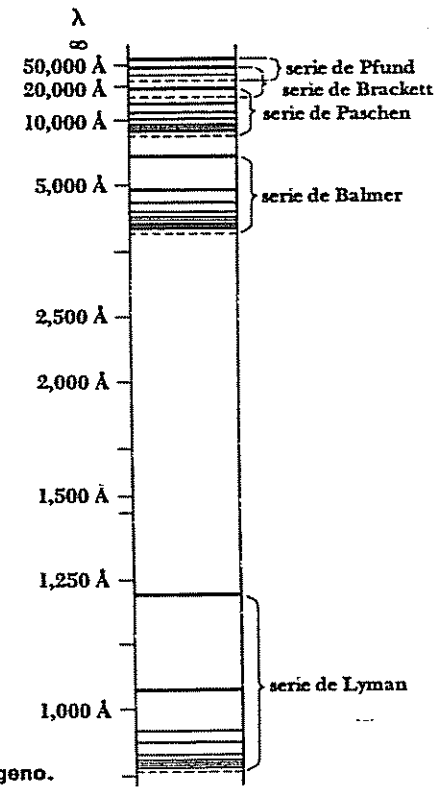


FIGURA 4-15 Series espectrales del hidrógeno.

Debido a que otros fenómenos aparentemente paradójicos, como el efecto fotoeléctrico y la difracción de electrones, encuentran su explicación en función de los conceptos cuánticos, resulta apropiado preguntarse si no será esto también verdadero para el caso del átomo.

Para comenzar, examinemos el comportamiento ondulatorio de un electrón en órbita alrededor de un núcleo de hidrógeno. La longitud de la onda de De Broglie de este electrón es

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

donde la velocidad del electrón v viene dada por la Ec. 4.13:

$$v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0 mr}}$$

por tanto,

$$\lambda = \frac{h}{e}\sqrt{\frac{4\pi\varepsilon_0 r}{m}} \tag{4.20}$$

Si damos el valor 5.3×10^{-11} m al radio r de la órbita electrónica, vemos que la longitud de onda del electrón es

$$\lambda = \frac{6.63 \times 10^{-34}\ \text{J-s}}{1.6 \times 10^{-19}\ \text{C}} \sqrt{\frac{4\pi \times 8.85 \times 10^{-12}\ \text{F/m} \times 5.3 \times 10^{-11}\ \text{m}}{9.1 \times 10^{-31}\ \text{kg}}}$$
$$= 33 \times 10^{-11}\ \text{m}$$

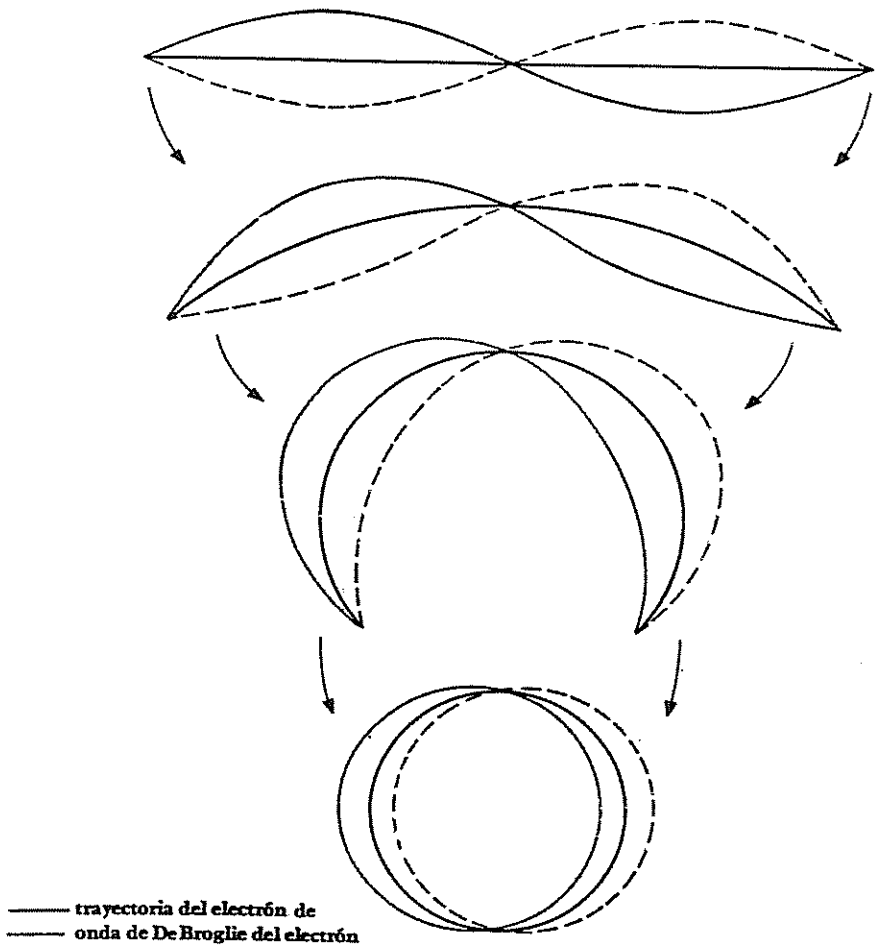


FIGURA 4-16 La órbita del electrón en un átomo de hidrógeno corresponde a una onda de de Broglie electrónica completa, cerrada sobre sí misma.

Esta longitud de onda tiene exactamente el mismo valor que la circunferencia de la órbita del electrón,

$$2\pi r = 33 \times 10^{-11}\ \text{m}$$

La órbita de un electrón en un átomo de hidrógeno corresponde así a una onda completa cerrada sobre sí misma (Fig. 4-16).

El hecho de que la órbita del electrón en un átomo de hidrógeno sea una longitud de onda del electrón en la circunferencia, proporciona la información necesaria para construir una teoría del átomo. Si consideramos las vibraciones de un anillo de alambre (Fig. 4-17), encontramos que sus longitudes de onda siempre están contenidas en un número integral de veces en su circunferencia, de modo que cada onda ensamble con la siguiente. Si el alambre fuera completamente rígido, estas vibraciones continuarían de un modo indefinido. ¿Por qué son

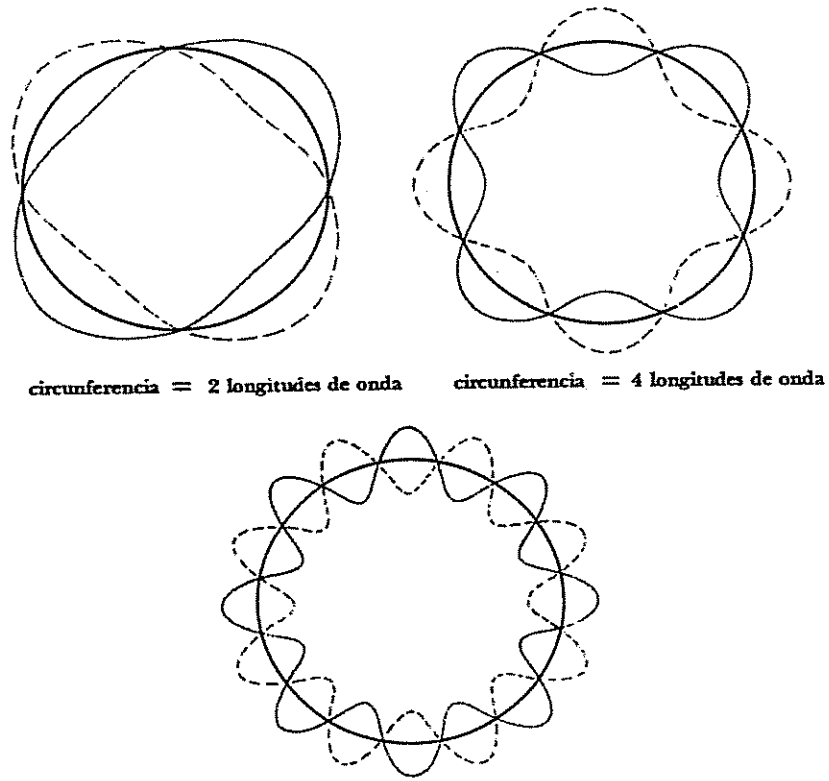


FIGURA 4-17 Vibraciones de un anillo de alambre

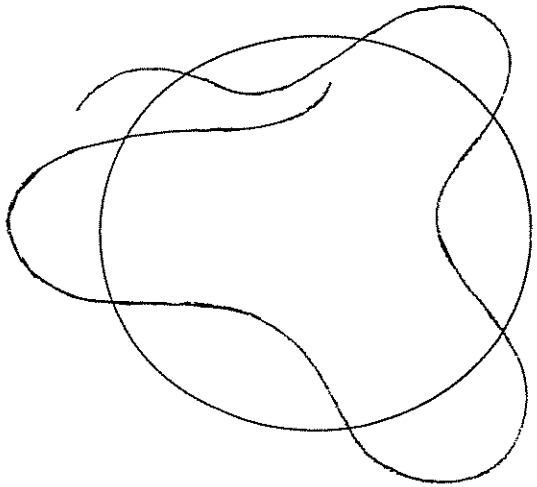


FIGURA 4-18 No puede persistir un número fraccionario de longitudes de onda porque se producirá una interferencia destructiva.

éstas las únicas vibraciones posibles en un anillo? Si un número no entero de longitudes de onda tiene lugar sobre el anillo (Fig. 4-18) se producirá una interferencia negativa a medida que las ondas se desplacen en torno a él, y las vibraciones desaparecerán rápidamente. Teniendo en cuenta que el comportamiento ondulatorio del electrón en el átomo de hidrógeno es análogo a las vibraciones de un anillo de alambre, se puede afirmar que **un electrón puede girar indefinidamente alrededor de un núcleo sin irradiar energía con tal que su órbita contenga un número entero de longitudes de la onda de De Broglie.**

Este postulado es decisivo para el conocimiento del átomo. En él se conjugan el carácter ondulatorio y corpuscular del electrón en un concepto único, ya que la longitud de onda del electrón se calcula a partir de la velocidad necesaria en la órbita para equilibrar la atracción electrostática del núcleo. Aunque nunca se pueden observar simultáneamente estos caracteres opuestos, en la naturaleza se presentan de manera inseparable.

Es fácil expresar la condición necesaria para que una órbita electrónica contenga un número entero de longitudes de la onda de De Broglie. La circunferencia de una órbita circular de radio r es $2\pi r$; y; por tanto, se puede escribir la condición de estabilidad orbital como

$$n\lambda = 2\pi r_n \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4.21}$$

donde r_n designa el radio de la órbita que contiene n longitudes de onda. El número entero n recibe el nombre de *número cuántico* de la órbita.

Sustituyendo λ, la longitud de onda del electrón dada por la Ec. 4.20, tenemos

$$\frac{nh}{e}\sqrt{\frac{4\pi\varepsilon_0 r_n}{m}} = 2\pi r_n$$

y, por tanto, las órbitas estables del electrón son aquellas cuyos radios vienen dados por

$$r_n = \frac{n^2h^2\varepsilon_0}{\pi me^2} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4.22}$$

El radio de la órbita más interna recibe habitualmente el nombre de *radio de Bohr* del átomo de hidrógeno y se designa por el símbolo a_0:

$$a_0 = r_1 = 5.3 \times 10^{-11}\ \text{m} = 0.53\ \text{Å}$$

Los radios restantes están dados en función de a_0 mediante la fórmula

$$r_n = n^2 a_0$$

de modo que el espacio entre órbitas adyacentes aumenta progresivamente.

4.8 NIVELES DE ENERGIA Y ESPECTROS

Las diversas órbitas permitidas implican diferentes energías electrónicas. La energía del electrón E_n viene dada en función del radio de la órbita r_n por la Ec. 4.14 como

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r_n}$$

Sustituyendo r_n por el valor de la Ec. 4.22, vemos que

$$E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2h^2}\left(\frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4.23}$$

Niveles de energía

A las energías dadas por esta ecuación se les llama *niveles de energía* del átomo de hidrógeno y se presentan en la Fig. 4-19. Los niveles son todos negativos, lo que significa que el electrón no tiene la energía suficiente para poder abandonar el átomo. Al nivel más bajo, E_1 se le llama *estado fundamental* o *base* y a los más altos, E_2, E_3, E_4, . . . *estados excitados*. Al aumentar el número cuántico n, la energía correspondiente E_n se aproxima cada vez más a cero; en el límite, para $n = \infty$, $E_\infty = 0$ y el electrón no está lo suficientemente ligado al núcleo para constituir un átomo. (Una energía positiva para un conjunto núcleo-electrón significa que el electrón no está unido al núcleo y no tiene condiciones cuánticas que cumplir; tales conjuntos, por supuesto, no constituyen un átomo.)

www.elsolucionario.org

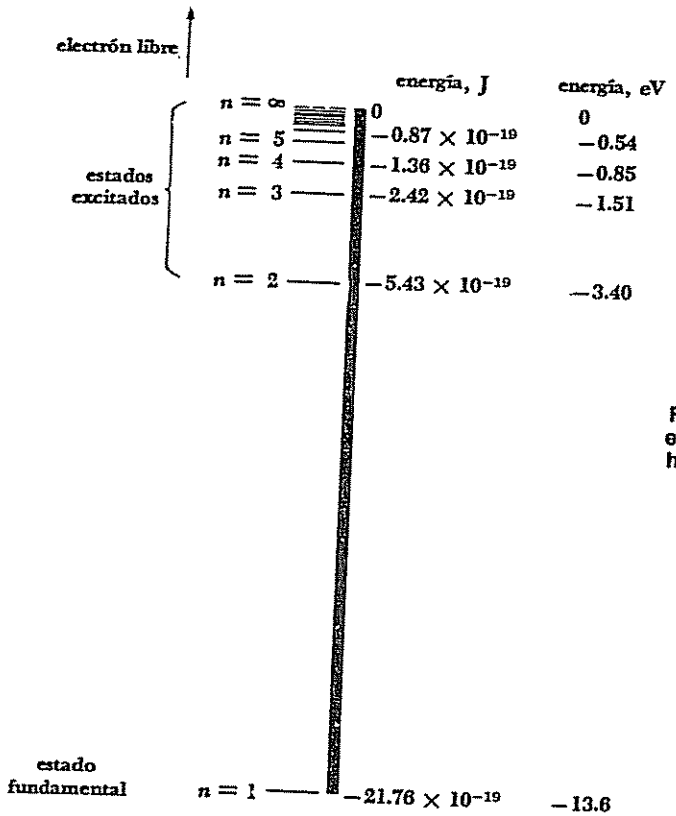


FIGURA 4-19 Niveles de energía del átomo de hidrógeno.

Es necesario ahora confrontar directamente las ecuaciones que se han obtenido con los datos experimentales. Un resultado experimental especialmente notable es que los átomos muestran líneas en los espectros de emisión y absorción: ¿Están de acuerdo estos espectros con nuestro modelo atómico?

La presencia de niveles de energía discretos pero definidos en el átomo de hidrógeno sugiere la existencia de una conexión con las líneas espectrales. Consideremos provisionalmente, que cuando un electrón en un estado excitado cae a un estado inferior, la energía perdida se emite en forma de un fotón de luz. De acuerdo con nuestro modelo, los electrones no pueden existir en un átomo, excepto en ciertos niveles energéticos determinados. El salto de un electrón de un nivel a otro, cediendo la energía rápidamente a un fotón en lugar de hacerlo de una manera gradual, encaja perfectamente con este modelo. Si el número cuántico del estado inicial (de mayor energía) es n_i y el del estado final (de menor energía) n_f, se puede establecer que

$$\text{Energía inicial} - \text{energía final} = \text{energía del fotón} \tag{4.24}$$
$$E_i - E_f = h\nu$$

donde ν es la frecuencia del fotón emitido.

Los estados inicial y final de un átomo de hidrógeno correspondientes a los números cuánticos n_i y n_f tienen las energías (Ec.4.23)

$$\text{Energía inicial} = E_i = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2h^2}\left(\frac{1}{n_i{}^2}\right)$$

$$\text{Energía final} = E_f = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2h^2}\left(\frac{1}{n_f{}^2}\right)$$

Por tanto, la diferencia de energía entre estos estados es

$$E_i - E_f = \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2h^2}\left(-\frac{1}{n_i{}^2}\right) - \left(-\frac{1}{n_f{}^2}\right)$$
$$= \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2h^2}\left(\frac{1}{n_f{}^2} - \frac{1}{n_i{}^2}\right)$$

La frecuencia ν del fotón liberado en este proceso es

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h}$$

$$= \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2h^3}\left(\frac{1}{n_f{}^2} - \frac{1}{n_i{}^2}\right) \tag{4.25}$$

En función de la longitud de onda λ del fotón, ya que

$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$

tenemos

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c}$$

y nos queda

$$= \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2ch^3}\left(\frac{1}{n_f{}^2} - \frac{1}{n_i{}^2}\right) \tag{4.26}$$

Espectro de hidrógeno

En la Ec. 4.26 se establece que la radiación que emite un átomo de hidrógeno excitado debe contener solamente ciertas longitudes de onda. Estas longitudes de onda, además, caen dentro de determinadas series que dependen del número cuántico n_f del nivel de energía final del electrón. Puesto que el número cuántico inicial n_i es siempre mayor que el final n_f en cada caso, ya que hay un exceso de energía que debe transformarse en fotón, las fórmulas calculadas para las cinco primeras series son

$$n_f = 1: \quad \frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2ch^3}\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 2, 3, 4, \ldots \qquad \text{Lyman}$$

$$n_f = 2: \quad \frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2ch^3}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 3, 4, 5, \ldots \qquad \text{Balmer}$$

$$n_f = 3: \quad \frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2ch^3}\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 4, 5, 6, \ldots \qquad \text{Paschen}$$

$$n_f = 4: \quad \frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2ch^3}\left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 5, 6, 7, \ldots \qquad \text{Brackett}$$

$$n_f = 5: \quad \frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2ch^3}\left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 6, 7, 8, \ldots \qquad \text{Pfund}$$

Estas series son idénticas a las series espectrales empíricas estudiadas anteriormente. La serie de Lyman corresponde a $n_f = 1$; la serie de Balmer, a $n_f = 2$; la serie de Paschen a $n_f = 3$; la serie de Brackett a $n_f = 4$; la serie de Pfund a $n_f = 5$.

Sin embargo, todavía no se considera probada la afirmación de que el espectro de líneas de hidrógeno esté originado por las transiciones electrónicas desde un estado de mayor energía a otro de menor. La etapa final es comparar el valor del término constante de las ecuaciones anteriores con el de la constante de Rydberg, R, de las ecuaciones empíricas 4.14 a 4.19. El valor de este término constante es

$$\frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2ch^3} = \frac{9.1 \times 10^{-31}\,\text{kg} \times (1.6 \times 10^{-19}\,\text{C})^4}{8 \times (8.85 \times 10^{-12}\,\text{F/m})^2 \times 3 \times 10^8\,\text{m/s} \times (6.63 \times 10^{-34}\,\text{J-s})^3}$$
$$= 1.097 \times 10^7\,\text{m}^{-1}$$

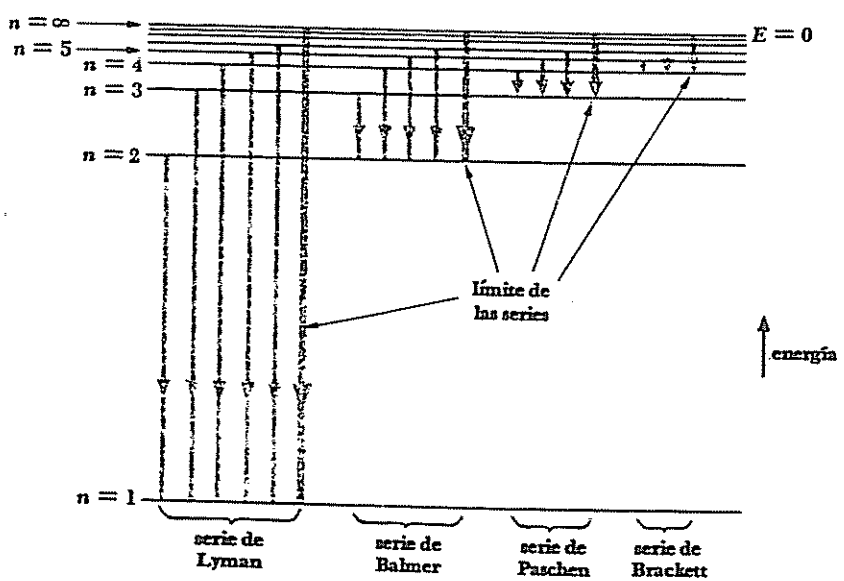


FIGURA 4-20 Líneas espectrales originadas en las transiciones entre niveles de energía.

que es exactamente el mismo que R. Esta teoría del átomo de hidrógeno, desarrollada esencialmente por Bohr en 1913, está de acuerdo cualitativa y cuantitativamente con los datos experimentales. La Fig. 4-20 muestra esquemáticamente cómo las líneas espectrales están relacionadas con los niveles de energía atómicos.

4.9 MOVIMIENTO NUCLEAR

En el anterior análisis se supuso que el núcleo (un solo protón) permanece estacionario mientras que el electrón gira alrededor de él. Lo que debe ocurrir en realidad es que tanto el núcleo como el electrón giran en torno a su centro de masa común, que está muy próximo al núcleo ya que la masa nuclear es mucho mayor que la del electrón (Fig. 4-21). Como el núcleo y los electrones están siempre en sitios opuestos del centro de masa, sus momenta lineales están en direcciones opuestas y el átomo conserva el momentum lineal.

Un sistema de este tipo equivale a una partícula de masa m' que gira alrededor de la posición de la partícula más pesada. (Esta equivalencia se demuestra en la mayoría de los textos de mecánica; ver Sec. 8.8.) Si m es la masa del electrón y M la masa nuclear, m' viene dada por

$$4.27 \qquad m' = \frac{mM}{m + M}$$

La cantidad m' recibe el nombre de *masa reducida* del electrón porque su valor es menor que m. Entonces, para hacer la corrección debida al movimiento del núcleo en el átomo de hidrógeno, lo único que debemos hacer

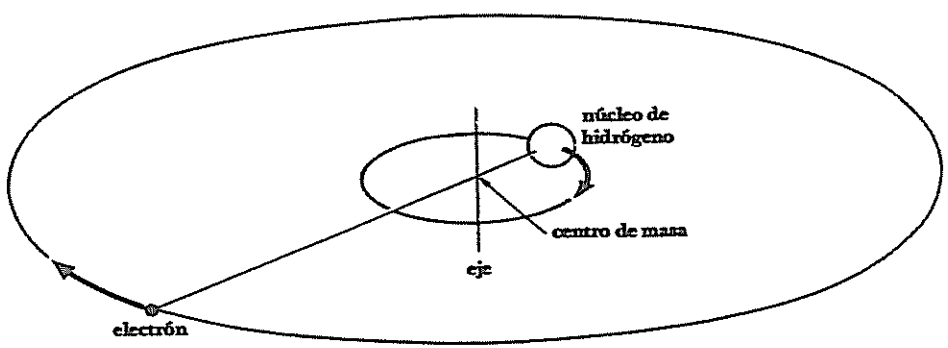


FIGURA 4-21 Tanto el electrón como el núcleo de un átomo de hidrógeno giran alrededor de un centro de masa común.

es imaginar que el electrón se sustituye por una partícula de masa m' y carga $-e$. Así, los niveles de energía del átomo quedan

$$E_n = -\frac{m'e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\left(\frac{1}{n^2}\right) \tag{4.28}$$

Debido al movimiento del núcleo, todos los niveles de energía del hidrógeno cambian según la fracción

$$\frac{m'}{m} = \frac{M}{M+m}$$
$$= \frac{1{,}836}{1{,}837}$$
$$= 0.99945$$

que es un aumento del 0.055%, ya que las energías E_n, menores en valor absoluto, son, por tanto, menos negativas. El uso de la Ec. 4.28 en lugar de la 4.23 elimina una pequeña pero marcada discrepancia entre los valores previstos de las longitudes de onda de las diversas líneas espectrales del átomo de hidrógeno y los valores reales encontrados en la experimentación. El valor de la constante de Rydberg R con ocho cifras significativas, sin tener en cuenta la corrección del movimiento del núcleo, es $1.0973731 \times 10^7\ m^{-1}$; la corrección lo reduce a $1.0967758 \times 10^7\ m^{-1}$.

La noción de masa reducida jugó un importante papel en el descubrimiento del *deuterio*, un isótopo del hidrógeno cuya masa atómica es el doble de la del hidrógeno ordinario, debido a la presencia de un neutrón y un protón en el núcleo. Como su masa nuclear es mayor, todas las líneas del espectro del deuterio se desplazan ligeramente hacia longitudes de onda más cortas que las del hidrógeno ordinario. La línea H_α del deuterio, por ejemplo, tiene una longitud de onda de 6,561 Å, mientras que la del hidrógeno es 6,568 Å. Como se ve, es una diferencia pequeña pero suficiente para poder identificar al deuterio.

4.10 EXCITACION ATOMICA

Hay dos mecanismos fundamentales que pueden excitar a un átomo a un nivel de energía superior al correspondiente a su estado fundamental y capacitarlo, por tanto, para que pueda irradiar energía. El primero consiste en provocar un choque con otra partícula, de modo que parte de la energía cinética de la unión la absorba el átomo. Un átomo excitado de esta manera volverá a su estado fundamental en un tiempo medio de 10^{-8} , emitiendo uno o más fotones. Para producir una descarga eléctrica en un gas enrarecido, se establece un campo eléctrico que acelera a los electrones y a los iones atómicos hasta que la energía cinética sea suficiente para excitar a los átomos que chocan contra ellos. Las señales de neón y las lámparas de vapor de mercurio son ejemplos familiares de

cómo un campo eléctrico intenso, aplicado entre dos electrodos de un tubo lleno de gas enrarecido, conduce a la emisión de la radiación espectral característica del gas. En el caso del neón, esta radiación da lugar a luz rojiza y, en el del vapor de mercurio, a luz azulada.

Un mecanismo de excitación distinto es aquel en que un átomo absorbe un fotón de luz, de modo que la energía que recibe es exactamente la cantidad necesaria para elevar al átomo a un nivel superior de energía. Por ejemplo, cuando un átomo de hidrógeno en el estado de $n=2$ cae en el de $n=1$, emite un fotón de longitud de onda 1,217 Å; la absorción de un fotón de longitud de onda 1,217 Å por un átomo de hidrógeno que se encuentra inicialmente en el estado $n=1$ lo llevará, por consiguiente, al estado $n=2$. Este proceso explica el origen de los espectros de absorción. Cuando pasa luz blanca, que contiene todas las longitudes de onda, a través de hidrógeno gaseoso, se absorben los fotones cuya longitud de onda corresponde a la transición entre los niveles energéticos. Los átomos de hidrógeno excitados resultantes vuelven a irradiar su energía de excitación casi simultáneamente, pero estos fotones salen al azar en todas direcciones y solamente algunos lo hacen en la dirección original del haz de luz blanca. Por tanto, las líneas oscuras en un espectro de absorción no son nunca completamente negras. Sólo aparecen así por contraste con el fondo claro. Es de esperar que el espectro de absorción de cualquier elemento sea idéntico a su espectro de emisión y, por consiguiente, que esté de acuerdo con la observación.

Los espectros atómicos no son el único medio que hay para investigar la existencia de discretos niveles de energía dentro del átomo. En 1914, Franck y Hertz realizaron una serie de experimentos sobre el primero de los mecanismos de excitación vistos anteriormente. Estas experiencias proporcionaron una demostración directa de la existencia de los niveles energéticos del átomo y, además, de que estos niveles son los mismos que los sugeridos por la observación de las líneas espectrales.

Franck y Hertz bombardearon vapores de diversos elementos con electrones de energía conocidos, utilizando un dispositivo como el de la Fig. 4-22. Entre la rejilla y la placa colectora se mantiene una pequeña diferencia de potencial V_0, de modo que solamente los electrones que tienen una energía superior a un cierto mínimo contribuyen a la corriente i que pasa a través del galvanómetro. Al aumentar el potencial de aceleración V, aumentan los electrones que llegan a la placa y, por tanto, i también aumenta (Fig. 4-22). Si se conserva la energía cinética en un choque entre un electrón y uno de los átomos gaseosos, simplemente el electrón saldrá despedido en dirección diferente de la original. Como un átomo es mucho más pesado que un electrón, este último prácticamente no perderá energía cinética en el proceso. Sin embargo, después de que el electrón alcanza un valor crítico de energía, la corriente de placa cae bruscamente. La explicación de este efecto se encuentra en que un electrón que choca contra un átomo puede ceder toda o parte de su energía cinética para excitarlo a un nivel energético por encima del de su estado base. Un

www.elsolucionario.org

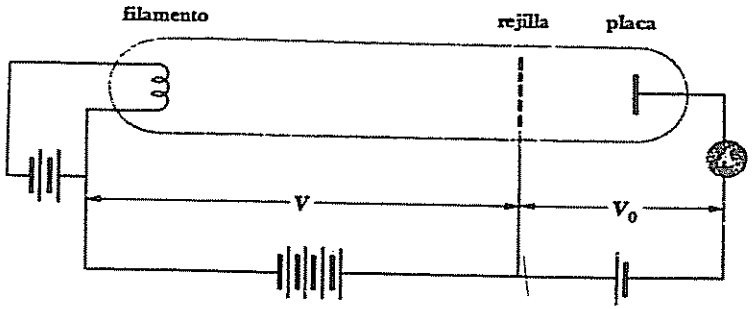


FIGURA 4-22 Aparato del experimento de Franck-Hertz.

choque de este tipo recibe el nombre de choque *inelástico* para distinguirlo del choque en que se conserva la energía cinética, llamado *elástico*. El valor crítico de la energía del electrón depende de la energía de excitación del átomo.

Por tanto, cuando se eleva aún más el potencial de aceleración V, la corriente de placa también aumenta, ya que los electrones tienen ahora la suficiente energía para llegar hasta la placa después de haber experimentado un choque inelástico. Finalmente, se vuelve a producir otra caída brusca de la corriente i de la placa debida al aumento de la energía de excitación necesaria para pasar a un nivel de energía más alto. Como se indica en la Fig. 4-23, así se han obtenido una serie de potenciales críticos para una especie de átomos determinados. Los potenciales más elevados son, por supuesto, el resultado de varios choques inelásticos y son múltiplos de los potenciales más bajos.

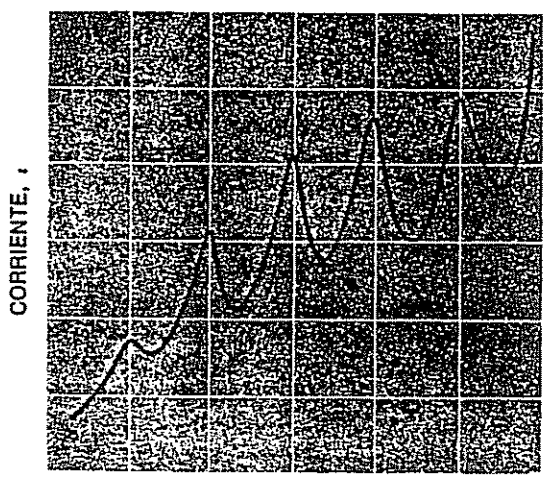


FIGURA 4-23 Resultados del experimento de Franck-Hertz mostrando los potenciales críticos.

Para comprobar que la interpretación de los potenciales críticos se debe a los discretos niveles de energía del átomo, Franck y Hertz observaron los espectros de emisión de los vapores durante el bombardeo de electrones. En el caso de vapor de mercurio, por ejemplo, encontraron que para excitar la línea espectral del mercurio de 2,536 Å era necesaria una energía mínima del electrón de 4.9 eV, y un fotón de 2,536 Å tiene exactamente una energía de 4.9 eV. Los experimentos de Franck-Hertz se realizaron muy poco tiempo después de que Bohr expusiera su teoría del átomo de hidrógeno, siendo, por tanto, una confirmación independiente de estas ideas básicas.

4.11 EL PRINCIPIO DE CORRESPONDENCIA

Los principios de la física cuántica, tan diferentes de los de la física clásica en el mundo microscópico, que queda más allá del alcance de nuestros sentidos, deben, no obstante, conducir a los mismos resultados que los de la física clásica en el campo donde experimentalmente estos últimos son válidos. Ya hemos visto que esta exigencia fundamental se satisface con la teoría de la relatividad, con la teoría cuántica de la radiación y con la teoría ondulatoria de la materia. Ahora veremos cómo se satisface también mediante la teoría atómica de Bohr.

Según la teoría electromagnética, un electrón que se mueve en una órbita circular irradia ondas electromagnéticas de frecuencia igual a la frecuencia de revolución y a los armónicos (esto es, múltiplos enteros) de aquella frecuencia. En un átomo de hidrógeno, la velocidad del electrón es según la Ec. 4.13

$$v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0 mr}}$$

siendo r el radio de su órbita. Por tanto, la frecuencia f de revolución del electrón es

$$f = \frac{\text{velocidad del electrón}}{\text{circunferencia de la órbita}}$$

$$= \frac{v}{2\pi r}$$

$$= \frac{e}{2\pi\sqrt{4\pi\varepsilon_0 mr^3}}$$

El radio r_n de una órbita estable viene dado en función de un número cuántico n por la Ec. 4.22

$$r_n = \frac{n^2 h^2 \varepsilon_0}{\pi m e^2}$$

de modo que la frecuencia de revolución es

4.29 $$f = \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2h^3}\left(\frac{2}{n^3}\right)$$

¿En qué circunstancias se comportaría de un modo clásico el átomo de Bohr? Si la órbita fuese tan grande que pudiéramos medirla directamente, el efecto cuántico no se apreciaría. Una órbita de 1 cm de diámetro cumple, por ejemplo, esta exigencia; su número cuántico sería aproximadamente $n = 10.000$, y a pesar de que un átomo de hidrógeno tan disparatadamente grande no podría existir en realidad porque sus energías estarían sólo infinitesimalmente por debajo de la energía de ionización, su existencia es posible teóricamente. ¿Por qué la teoría de Bohr predice que un átomo en estas condiciones radiará? Según la Ec. 4.25, un átomo de hidrógeno que cae del nivel energético n_i al n_f emite un fotón de frecuencia

$$\nu = \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2h^3}\left(\frac{1}{n_f{}^2} - \frac{1}{n_i{}^2}\right)$$

Escribamos n para el número cuántico inicial n_i y $n - p$ (siendo $p = 1,2,3,\ldots$) para el número cuántico final n_f. Haciendo esta sustitución

$$\nu = \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2h^3}\left[\frac{1}{(n-p)^2} - \frac{1}{n^2}\right]$$
$$= \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2h^3}\left[\frac{2np - p^2}{n^2(n-p)^2}\right]$$

Cuando n_i y n_f son muy grandes, n es mucho mayor que p y

$$2np - p^2 \approx 2np$$
$$(n-p)^2 \approx n^2$$

de modo que

4.30 $$\nu = \frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2h^3}\left(\frac{2p}{n^3}\right)$$

Cuando $p = 1$, la frecuencia ν de la radiación es la misma que la frecuencia de rotación f del electrón en la órbita (Ec. 4.29). Los armónicos de esta frecuencia se radian cuando $p = 2,3,4,\ldots$ Por tanto, la descripción cuántica y la clásica del átomo de hidrógeno llegan al mismo resultado para el caso límite de números cuánticos muy elevados. Cuando $n = 2$, la Ec. 4.29 da una frecuencia de radiación que difiere de la dada por la Ec. 4.25 casi en un 300%, mientras que cuando $n = 10,000$, la discrepancia es solamente de un 0.01% .

El hecho de que la física cuántica dé los mismos resultados que la física clásica al tratar con números cuánticos elevados fue llamado por Bohr *principio de correspondencia*. Este principio ha jugado un papel muy importante en el desarrollo de la teoría cuántica de la materia.

Problemas

* 1. Una partícula alfa de 5 MeV alcanza a un núcleo de oro con un parámetro de impacto de 2.6×10^{-13} m. ¿Bajo qué ángulo será dispersada?

* 2. ¿Cuál es el parámetro de impacto de una partícula alfa de 5 MeV que al alcanzar un núcleo de oro sufre una dispersión de 10°?

* 3. ¿Qué fracción de un haz de partículas alfa de 7.7 MeV que inciden sobre una lámina de oro de 3×10^{-7}m de espesor se dispersa con un ángulo menor de 1°?

* 4. ¿Qué fracción de un haz de partículas alfa de 7.7 MeV que inciden sobre una lámina de oro de 3×10^{-7}m de espesor se dispersa según un ángulo igual o superior a 90°?

* 5. Demostrar que se dispersa el doble de partículas alfa por una lámina bajo un ángulo entre 60 y 90° que bajo un ángulo igual o mayor que 90°.

* 6. Un haz de partículas alfa de 8.3 MeV se lanza sobre una lámina de aluminio. Se encuentra que la fórmula de dispersión de Rutherford no se cumple para ángulos de dispersión superiores a 60°, aproximadamente. Si se supone que la partícula alfa tiene un radio de 2×10^{-15}m, hallar el radio del núcleo de aluminio.

7. Determinar la mínima distancia de aproximación de los protones de 1 MeV que inciden sobre núcleos de oro.

8. Hallar la mínima distancia de aproximación de los protones de 8 MeV que inciden sobre núcleos de oro.

9. La deducción de la fórmula de dispersión de Rutherford se hizo sin tener en cuenta la teoría de la relatividad. Justificar esta aproximación calculando la relación de masas entre una partícula alfa de 8 MeV y una partícula alfa en reposo.

10. Hallar la frecuencia de rotación del electrón en el modelo clásico del átomo de hidrógeno. ¿En qué región del espectro se encuentran las ondas electromagnéticas de esta frecuencia?

11. La intensidad del campo eléctrico a una distancia r del centro de una esfera uniformemente cargada, de radio R y carga total Q, es $Qr/4\pi\varepsilon_0R^3$, donde $r < R$. Semejante esfera corresponde al modelo de Thomson del átomo. Demostrar que el electrón en esta esfera ejecuta un movimiento armónico simple alrededor de su centro y obtener una fórmula para la frecuencia de este movimiento. Evaluar la frecuencia de las oscilaciones del electrón para el caso

del átomo de hidrógeno y compararlo con las frecuencias de las líneas espectrales del hidrógeno.

12. Determinar la longitud de onda de la línea espectral correspondiente a la transición en el hidrógeno del estado $n=6$ al $n=3$.

13. Hallar la longitud de onda del fotón emitido por un átomo de hidrógeno al pasar del estado $n=10$ a su estado fundamental.

14. ¿Qué energía se requiere para extraer a un electrón del átomo de hidrógeno en el estado $n=2$?

15. Un haz de electrones bombardea una muestra de hidrógeno. ¿A qué diferencia de potencial se deben acelerar los electrones si se desea que se emita la primera línea de la serie Balmer?

16. Hallar la velocidad de retroceso de un átomo de hidrógeno cuando emite un fotón al pasar del estado $n=4$ al $n=1$.

17. ¿Cuántas revoluciones efectúa un electrón de un átomo de hidrógeno en el estado $n = 2$s, antes de caer al estado $n = 1$? (La vida media de un estado excitado es 10^{-8}s, aproximadamente.)

18. La vida media de un estado atómico excitado es 10^{-8}s. Si la longitud de onda de la línea espectral asociada con la desaparición de este estado es 5,000 Å, determinar la anchura de la línea.

19. ¿A qué temperatura, en estado gaseoso, se igualará la energía cinética molecular media con la energía de enlace de un átomo de hidrógeno?

20. Calcular el momentum angular en torno al núcleo de un electrón en la órbita n-ésima de un átomo de hidrógeno y, a partir de esto, demostrar que una expresión alternativa del primer postulado de Bohr es que el momentum angular de este átomo debe ser $n\hbar$. (De hecho la cuantización del momentum angular en unidades de $\hbar$ era el punto de partida del trabajo original de Bohr, ya que todavía no habían sido propuestas las hipótesis sobre las ondas de De Broglie. Veremos en el Cap. 8 que esta regla de cuantización se aplica únicamente a la componente del momentum angular de un sistema en una dirección particular, en tanto que la magnitud del momentum angular total es cuantizada de una manera algo diferente.

21. Una mezcla de hidrógeno ordinario y tritio (isótopo que tiene un núcleo con una masa aproximadamente tres veces mayor que el del hidrógeno ordinario) se excita y se observa el espectro. ¿Qué separación tendrán las longitudes de onda de las líneas H_α de los dos tipos de hidrógeno?.

22. Un mesón μ^- ($m = 207\, m_e$) puede ser capturado por un protón para formar un "átomo mesónico". Hallar el radio de la primera órbita de Bohr de este átomo.

23. Un mesón μ^- se encuentra en el estado $n=2$ de un átomo de titanio. Hallar la energía radiada cuando el átomo mesónico cae a su estado base.

24. Un positronio es un sistema que consta de un positrón (electrón positivo) y un electrón. *a*) Comparar la longitud de onda de un fotón emitido en la transición $n=3 \rightarrow n=2$ en el positronio con la línea H_α. *b*) Comparar la energía de ionización del positronio con la del hidrógeno.

25. *a*) Deducir una fórmula de los niveles de energía de *un átomo hidrogenoideo* que es un ion como el He^+ o Li^{++} cuya carga nuclear es $+Ze$ y que contiene un solo electrón. *b*) Trazar los niveles de energía de un ion de He^+ y compararlos con los niveles de energía del átomo de H. *c*) Un electrón se une con un núcleo de helio para formar un ion de He^+. Hallar la longitud de onda del fotón emitido en este proceso si se considera que el electrón carecía de energía cinética al combinarse con el núcleo.

26. Utilizar el principio de incertidumbre para determinar el radio r_1 del átomo de hidrógeno en su estado base de la siguiente manera. Primero, encontrar una fórmula para la energía cinética del electrón en función del momentum que el electrón debe tener si esta confinado en una región de dimensión lineal r_1. Sumar esta energía cinética a la energía potencial electrostática de un electrón a la distancia r_1 de un protón, y derivar con respecto a r_1 la expresión resultante de la energía total E del electrón, para hallar el valor de r_1 para el que E es mínimo. Comparar el resultado con el que se obtiene mediante la Ec. 4.22 para $n=1$.

www.elsolucionario.org

MECANICA CUANTICA 5

La teoría atómica de Bohr, que se estudió en el capítulo anterior, justifica algunos datos experimentales de forma convincente, pero aún así tiene limitaciones. Mientras que la teoría de Bohr predice correctamente las series espectrales del hidrógeno, isótopos del hidrógeno y átomos hidrogenoideos, es incapaz de explicar por qué algunas líneas espectrales son más intensas que otras (es decir, por qué algunas transiciones entre niveles de energía tienen mayor probabilidad de producirse); y no puede justificar el hecho de que muchas líneas espectrales se componen realmente de varias líneas separadas, cuyas longitudes de onda difieren ligeramente. Y, tal vez lo más importante, que no nos permite lograr lo que una teoría bien fundamentada del átomo haría posible: dar una visión completa de cómo los átomos individuales interaccionan entre sí para crear conjuntos macroscópicos de materia con las propiedades físicas y químicas que actualmente conocemos.

Es conveniente aclarar que las objeciones hechas a la teoría de Bohr, no tienen una intención destructiva —puesto que se reconoce que su teoría revolucionó el pensamiento científico— sino que se hacen para resaltar que aún era necesario un estudio de fenómenos atómicos de caracter más general. Dichos estudios fueron desarrollados, en 1925-1926, por Erwin Schödinger, Werner Heisenberg y otros, bajo el nombre idóneo de *mecánica cuántica*. A principios de 1930, la aplicación de la mecánica cuántica a problemas relacionados con los núcleos, átomos, moléculas y materia en el estado sólido, hizo posible comprender un extenso conjunto de datos, de otra manera enigmáticos e —un atributo esencial de cualquier teoría— inducir a predicciones de exactitud notable.

5.1 INTRODUCCION A LA MECANICA CUANTICA

La diferencia fundamental entre la mecánica newtoniana y la mecánica cuántica reside en lo que ellas describen. La mecánica newtoniana atañe al movimiento de una partícula bajo la influencia de fuerzas aplicadas, y da por admitido que se pueden medir magnitudes, como posición, masa, velocidad, aceleración, etc., de la partícula. Esta suposición es, por supuesto, válida en nuestra experiencia cotidiana, y la mecánica newtoniana proporciona la explicación "correcta" del comportamiento de los cuerpos en movimiento, en el sentido de que los valores predichos por magnitudes observables concuerdan con los valores medidos.

La mecánica cuántica trata igualmente de las relaciones entre magnitudes observables, pero el principio de incertidumbre altera radicalmente la definición de "magnitud observable" en el campo atómico. De acuerdo con el principio de incertidumbre, la posición y el momentum de una partícula no se pueden medir simultáneamente con precisión, mientras que en la mecánica newtoniana se supone que ambos tienen un valor definido y verificable en cada instante. Las cantidades cuyas relaciones busca la mecánica cuántica son *probabilidades*. En vez de afirmar, por ejemplo, que el radio de la órbita del electrón en un estado fundamental del átomo de hidrógeno es siempre exactamente 5.3×10^{-11} m, la mecánica cuántica afirma que éste es el radio más probable; si realizamos un experimento adecuado, la mayor parte de las pruebas darán un valor distinto, más grande o más pequeño, pero el valor más probable será aproximadamente 5.3×10^{-11} m.

A primera vista, la mecánica cuántica parece un pobre sustituto de la mecánica newtoniana, pero una investigación más profunda revela un hecho notable: *la mecánica newtoniana no es más que una versión aproximada de la mecánica cuántica*. Las evidencias proclamadas por la mecánica newtoniana eran ilusorias, y su conformidad con la experiencia es una consecuencia del hecho de que los cuerpos macroscópicos se componen de tantos átomos individuales que las desviaciones del comportamiento promedio son inapreciables. En lugar de dos grupos de principios físicos, uno para el universo macroscópico y otro para el universo microscópico, hay solamente un grupo y la mecánica cuántica representa nuestro mejor esfuerzo hasta la fecha en su formulación.

5.2 LA ECUACION DE ONDA

Como mencionamos en el Cap. 3, la cantidad con que está relacionada la mecánica cuántica es la *función de onda* Ψ de un cuerpo. Aunque Ψ no tiene interpretación física, el cuadrado de su valor absoluto $|\Psi|^2$ (o $\Psi\Psi^*$ si Ψ es compleja) calculado para un punto y en un instante determinado es proporcional a la probabilidad de encontrar experimentalmente al cuerpo ahí

y en ese instante. El problema de la mecánica cuántica es determinar Ψ para un cuerpo cuando su libertad de movimiento está limitada por la acción de fuerzas externas.

Incluso antes de considerar el cálculo real de Ψ, podemos establecer algunos requisitos que siempre se deben cumplir. En primer lugar, ya que $|\Psi|^2$ es proporcional a la probabilidad P de encontrar el cuerpo descrito por Ψ, la integral de $|\Psi|^2$ sobre todo el espacio debe ser finita, ya que el cuerpo está *en alguna parte*. Si

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 \, dV \tag{5.1}$$

es 0, la partícula no existe y la integral evidentemente no puede ser ∞ y tener cierto significado; $|\Psi|^2$ no puede ser negativa o compleja a causa del camino seguido para definirla, y así la única posibilidad dada es que su integral sea una cantidad finita para que Ψ describa apropiadamente un cuerpo real.

Generalmente es conveniente tener $|\Psi|^2$ *igual* a la probabilidad P de encontrar la partícula descrita por Ψ, en lugar de ser simplemente proporcional a P. Para que $|\Psi|^2$ sea igual a P se tiene que cumplir la relación

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 \, dV = 1 \tag{5.2}$$

Normalización

ya que

$$\int_{-\infty}^{\infty} P \, dV = 1$$

es la afirmación matemática de que la partícula existe en algún lugar en todo momento. Una función de onda que obedezca a la Ec. 5.2 se dice que está *normalizada*. Toda función de onda aceptable puede ser normalizada multiplicando por una constante adecuada; observemos brevemente cómo se lleva a cabo.

Además de ser normalizable, Ψ debe tener un solo valor, ya que P debe tener un valor único en un tiempo y un lugar determinados. Otra condición que Ψ debe obedecer es que ella y sus derivadas parciales $\partial\Psi/\partial x$, $\partial\Psi/\partial y$, $\partial\Psi/\partial z$ sean continuas en cualquier lugar.

La *ecuación de Schrödinger*, que es la ecuación fundamental de la mecánica cuántica, en el mismo sentido que la segunda ley del movimiento es la ecuación fundamental de la mecánica newtoniana, es una ecuación de onda en la variable Ψ. Antes de abordar la ecuación de Schrödinger repasemos la ecuación de onda general

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \tag{5.3}$$

Ecuación de onda

que gobierna a una onda cuya cantidad variable es y que se propaga en la dirección de x con velocidad v. En el caso de una onda en una cuerda tensa, y

es el desplazamiento de la cuerda medido desde el eje x; en el caso de una onda sonora, y es la diferencia de presión; en el caso de una onda luminosa y es la magnitud del campo eléctrico o la del campo magnético. La ecuación de onda se deduce en los libros de texto de mecánica para ondas mecánicas y en los de electricidad y magnetismo para ondas electromagnéticas.

Las soluciones de la ecuación de onda pueden ser de varios tipos, como consecuencia de la variedad de ondas que puede haber (un pulso único en desplazamiento, un tren de ondas de amplitud y longitud de onda constantes, un tren de ondas superpuestas de amplitudes y longitudes de onda idénticas, un tren de ondas superpuestas de amplitudes y longitudes de onda diferentes, una onda estacionaria en una cuerda fija por ambos extremos, etc.). Todas las soluciones deben ser de la forma

$$y = F\left(t \pm \frac{x}{v}\right) \tag{5.4}$$

donde F es cualquier función que pueda ser diferenciada. Las soluciones $F(t - x/v)$ representan ondas que viajan en el sentido $+x$, y las soluciones $F(t + x/v)$ representan ondas que viajan en el sentido $-x$

Aquí nos interesa el equivalente ondulatorio de una partícula "libre", es decir, una partícula que no esté bajo la influencia de ninguna fuerza y que, por tanto, viaja en una trayectoria recta a velocidad constante. Este equivalente corresponde a la solución general de la Ec. 5.3 para ondas armónicas no amortiguadas (es decir, de amplitud constante A), monocromáticas (de frecuencia angular ω constante) en la dirección $+x$,

$$y = Ae^{-i\omega(t-x/v)} \tag{5.5}$$

En esta fórmula, y es una cantidad compleja, con parte real e imaginaria. Como

$$e^{-i\theta} = \cos\theta - i \operatorname{sen}\theta \tag{5.6}$$

la Ec. 5.5 se puede escribir en la forma

$$y = A\cos\omega\left(t - \frac{x}{v}\right) - iA \operatorname{sen}\omega\left(t - \frac{x}{v}\right) \tag{5.7}$$

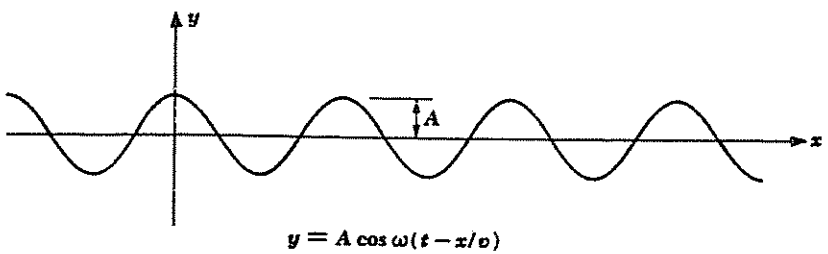


FIGURA 5-1 Ondas en el plano xy desplazándose en la dirección y el sentido $+x$ a lo largo de un hilo estirado situado sobre el eje x.

Unicamente la parte real de la Ec. 5.7 tiene significado en el caso de ondas en una cuerda en tensión, donde y representa el desplazamiento de la cuerda con respecto a su posición normal (Fig. 5-1); en este caso, la parte imaginaria se descarta porque no se puede aplicar.

5.3 LA ECUACION DE SCHRODINGER: LA FORMA DEPENDIENTE DEL TIEMPO

En mecánica cuántica, la función de onda Ψ corresponde a la variable de onda y del movimiento ondulatorio general. Sin embargo, Ψ, a diferencia de y, no es una cantidad mensurable en sí misma y puede, por tanto, ser compleja. Por esta razón supondremos que Ψ está especificada en la dirección x por

$$\Psi = Ae^{-i\omega(t-x/v)} \tag{5.8}$$

Cuando se sustituye en esta fórmula ω por $2\pi\nu$ y v por $\lambda\nu$, obtenemos

$$\Psi = Ae^{-2\pi i(\nu t - x/\lambda)} \tag{5.9}$$

que es conveniente, ya que sabemos que ν y λ están en función de la energía total E y del momentum p de la partícula descrita por Ψ. Ya que

$$E = h\nu = 2\pi\hbar\nu$$

y

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

tenemos

$$\Psi = Ae^{-(i/\hbar)(Et-px)} \tag{5.10}$$

La Ec. 5.10 es una descripción matemática de la onda equivalente a una partícula libre, de energía total E y momentum p, que se mueve en la dirección y sentido $+x$, del mismo modo que la Ec. 5.5 es la descripción matemática de un desplazamiento de onda armónica que se mueve libremente a lo largo de una cuerda en tensión.

La expresión de la función de onda Ψ, dada por la Ec. 5.10, es correcta solamente para partículas que se mueven libremente, pero estamos más interesados en situaciones donde el movimiento de una partícula está sujeto a varias restricciones. Un caso importante es, por ejemplo, el de un electrón ligado a un átomo por el campo eléctrico de su núcleo. Lo que debemos hacer ahora es obtener la ecuación diferencial fundamental para Ψ, la que se puede resolver en una situación específica.

Comenzamos por la diferenciación de la Ec. 5.10 dos veces respecto a x,

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi \tag{5.11}$$

www.elsolucionario.org

y una vez respecto a t

5.12 $$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\Psi$$

A velocidades pequeñas comparadas con la de la luz, la energía total E de una partícula es la suma de su energía cinética $p^2/2m$ y de su energía potencial V, donde V es una función general de la posición x y del tiempo t:

5.13 $$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

Multiplicando ambos miembros de esta ecuación por la función de onda

5.14 $$E\Psi = \frac{p^2\Psi}{2m} + V\Psi$$

De las Ecs. 5.11 y 5.12 vemos que

5.15 $$E\Psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

y

5.16 $$p^2\Psi = -\hbar^2\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

Sustituyendo estas expresiones de $E\Psi$ y $p^2\Psi$ en la Ec. 5.14 obtenemos

5.17 $$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi$$

Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en una dimensión

La Ec. 5.17 es la *ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo*. En tres dimensiones, la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es

5.18 $$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}\right) + V\Psi$$

donde la energía potencial V es una función de x,y,z y t. Cualquier restricción que se pueda presentar en el movimiento de la partícula afectará a la función de la energía potencial V. Una vez conocida V, se puede resolver la ecuación de Schrödinger para la función de onda Ψ de la partícula, cuya densidad de probabilidad Ψ^2 se puede determinar para x,y,z,t.

Vale la pena estudiar la manera en que se obtuvo la ecuación de Schrödinger a partir de la función de onda de una partícula en movimiento libre. Es posible aplicar la ecuación de Schrödinger desde el caso especial de una partícula libre (energía potencial constante V) hasta el caso general de una partícula sujeta a fuerzas arbitrarias que varían en el tiempo y en el espacio $[V = V(x,y,z,t)]$, pero, a priori, no hay forma de *probar* que esta amplitud de aplicación sea correcta. Todo cuanto podemos hacer para postular la ecuación de Schrödinger es resolverla para una variedad de situaciones físicas, y comparar los resultados de los cálculos con los de los experimentos. Si concuerdan, el postulado implícito en la ecuación de Schrödinger es válido; en caso contrario, hay que descartar el postulado, y tener que emplear otro método. En otras palabras, **la ecuación de Schrödinger no se puede deducir de "primeros principios", sino que representa en sí un primer principio.**

En la práctica, la ecuación de Schrödinger ha resultado completamente precisa en la predicción de resultados experimentales. Para estar seguros, debemos tener presente que la Ec. 5.18 se puede usar únicamente en problemas no relativistas, y se requiere una formulación más elaborada cuando las velocidades de las partículas sean comparables con la de la luz. Debido a que está de acuerdo con la experimentación dentro del campo de su aplicación, podemos considerar a la ecuación de Schrödinger como representante de un postulado afortunado sobre algunos aspectos del mundo físico. Por todos sus éxitos, esta ecuación resulta un postulado en el mismo sentido que los postulados de la relatividad especial o la mecánica estática: Ninguno de éstos se puede deducir de otros principios, y cada uno es una generalización fundamental, ni más ni menos válida que los datos empíricos sobre los que se basan. Vale la pena notar en esta asociación que la ecuación de Schrödinger no representa un aumento en el número de postulados necesarios para describir el funcionamiento del mundo físico, ya que la segunda ley de Newton, del movimiento, considerada en mecánica clásica como un postulado, se puede deducir de la ecuación de Schrödinger con la condición de que las cantidades que se relacionen se consideren como promedios y no como valores definidos.

5.4 VALORES PROBABLES

Una vez resuelta la ecuación de Schrödinger para una partícula en una situación física dada, la función de onda resultante $\Psi(x,y,z,t)$ contiene toda la información sobre la partícula permitida por el principio de incertidumbre. Excepto en el caso de variables que en algunos casos resultan ser cuantizadas, esta información es en la forma de probabilidades y no en forma de números específicos.

Como ejemplo, calculemos el *valor probable* $\langle x \rangle$ de la posición de una partícula limitada al eje x que está descrita por la función de onda $\Psi(x,t)$. Este es el valor de x que obtendríamos si determináramos experimentalmente las posiciones de un gran número de partículas descritas por la misma función de onda en un instante t y promediáramos después los resultados.

Para que el procedimiento quede claro debemos, en primer lugar, contestar a una pregunta ligeramente diferente: ¿Cuál es la posición promedio $\bar{x}$ de un número de partículas distribuidas a lo largo del eje x de manera que haya N_1 partículas en x_1, N_2 partículas en x_2, etc.? La posición promedio en este caso es la misma que el centro de masa de la distribución, y así

$$\bar{x} = \frac{N_1x_1 + N_2x_2 + N_3x_3 + \cdots}{N_1 + N_2 + N_3 + \cdots}$$
$$= \frac{\Sigma N_i x_i}{\Sigma N_i}$$

Cuando se trata de una sola partícula debemos sustituir el número N_i de partículas en x_i por la probabilidad P_i de encontrar la partícula en un intervalo dx en x_i. Esta probabilidad es

$$P_i = |\Psi_i|^2\, dx$$

donde Ψ_i es la función de onda de la partícula calculada en $x = x_i$. Efectuando esta sustitución y cambiando las sumas por integrales, vemos que el valor probable de la posición de una partícula es

5.19 $$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x|\Psi|^2\, dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2\, dx}$$

Si Ψ es una función de onda normalizada, el denominador de la Ec. 5.19 es igual a la probabilidad de que la partícula exista en algún lugar entre $x = -\infty$ y $x = \infty$, y, por tanto, tiene el valor 1. Así

5.20 $$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x|\Psi|^2\, dx$$

Esta fórmula establece que $\langle x \rangle$ está situada en el centro de masa (por decirlo así) de $|\Psi|^2$; si se representa gráficamente a $|\Psi|^2$ en función de x y se recorta el área limitada por la curva y el eje x, el punto de equilibrio estará en $\langle x \rangle$.

Se puede seguir el mismo procedimiento para obtener el valor probable $\langle G(x) \rangle$ de cualquier cantidad [por ejemplo, la energía potencial $V(x)$] que es una función de la posición x de una partícula descrita por una función de onda Ψ. El resultado es

5.21 $$\langle G(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} G(x)|\Psi|^2\, dx$$ Valor probable

Esta fórmula es válida aun cuando $G(x)$ varíe con el tiempo, debido a que $\langle G(x) \rangle$ en cualquier evento se debe valorar en un tiempo determinado t, ya que Ψ es en sí función de t.

5.5 LA ECUACION DE SCHRÖDINGER: LA FORMA EN ESTADO ESTACIONARIO

En muchas situaciones, la energía potencial de una partícula no depende explícitamente del tiempo; las fuerzas que actúan sobre ella y, por tanto, V, varían solamente con la posición de la partícula. Cuando esto se cumple, la ecuación de Schrödinger se puede simplificar eliminando todo lo referente a t. Notemos que se puede escribir la función de onda unidimensional de una partícula libre

$$\Psi = Ae^{-(i/\hbar)(Et-px)}$$
$$= Ae^{-(iE/\hbar)t}e^{+(ip/\hbar)x}$$
5.22 $$= \psi e^{-(iE/\hbar)t}$$

Esto es, Ψ es el producto de una función dependiente del tiempo $e^{-(iE/\hbar)t}$ y una función dependiente de la posición ψ. Sucede que las variaciones con el tiempo de *todas* las funciones de partículas, sobre las que actúan fuerzas estacionarias, tienen la misma forma que las de una partícula libre. Sustituyendo la Ψ de la Ec. 5.22 en la Ec. de Schrödinger dependiente del tiempo, encontramos que

$$E\psi e^{-(iE/\hbar)t} = -\frac{\hbar_2}{2m}e^{-(iE/\hbar)t}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi e^{-(iE/\hbar)t}$$

y, así, dividiendo ambos miembros entre el factor exponencial común,

5.23 $$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0$$ Ecuación de Schrödinger en estado estacionario en una dimensión

La Ec. 5.23 es la *ecuación de Schrödinger en estado estacionario*. En tres dimensiones es

5.24 $$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0$$ Ecuación de Schröndinger en estado estacionario en tres dimensiones

En general, la ecuación de Schrödinger en estado estacionario se puede resolver únicamente para algunos valores de la energía E. Lo que queremos decir con esto no se refiere a las dificultades matemáticas que se pueden presentar, sino a algo más fundamental. "Resolver" la ecuación de Schrödinger para un sistema dado significa obtener una función de onda ψ que no sólo obedezca a la ecuación y a las condiciones en la frontera que existan, sino que también cumplan las condiciones de una función de onda aceptable, es decir, que la función y su derivada sean continuas finitas y univaluadas. De esta manera, la cuantización de energía aparece en la mecánica ondulatoria como un elemento natural de la teoría. Así, la cuantización de la energía en el

mundo físico se ha revelado como un fenómeno universal característico de *todos* los sistemas estables.

Una analogía más conocida y muy aproximada a la manera como se presenta la cuantización de energía en las soluciones de la ecuación de Schrödinger es la de ondas estacionarias en una cuerda tensa de longitud L, fija por ambos extremos. Aquí, en vez de tener una sola onda que se propaga indefinidamente en una dirección, las ondas se desplazan simultáneamente tanto en el sentido $+x$ como en el $-x$, sujetas a la condición de que el desplazamiento y es siempre cero en ambos extremos de la cuerda. Una función aceptable $y(x,t)$ para el desplazamiento debe, con sus derivadas, obedecer los mismos requisitos de continuidad, ser finita y poseer un valor único como Ψ y, además, debe ser real ya que y representa una cantidad mensurable directamente. Las únicas soluciones de la ecuación de onda

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$

que concuerdan con estas múltiples limitaciones son las que para las longitudes de onda están dadas por

$$\lambda_n = \frac{2L}{n+1} \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

como se indica en la Fig. 5-2. La *combinación* de la ecuación de onda y las restricciones inherentes a la naturaleza de su solución nos lleva a concluir que $y(x,t)$ puede existir únicamente para algunas longitudes de onda λ_n.

Los valores de energía E_n para los que se puede resolver la ecuación de Schrödinger reciben el nombre de *eigenvalores* y las funciones de onda correspondientes ψ_n reciben el nombre de *eigenfunciones*. (Estos términos vienen del alemán *eigenwert*, que significa "valor propio o característico", y *eigenfunktion* o "función propia o característica".) Un ejemplo de conjunto de eigenvalores lo constituyen los niveles discretos de energía del átomo de hidrógeno

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\left(\frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

En el capítulo 6 veremos que estos valores particulares de E son los únicos que proporcionan funciones de onda aceptables del electrón en el átomo de hidrógeno.

Un ejemplo importante de variable dinámica, diferente de la energía total, que se ha visto que está cuantizado en sistemas estables, es el del momentum angular L. En el caso del átomo de hidrógeno encontraremos que los eigenvalores de la magnitud del momentum angular total se especifican por

$$L_l = \sqrt{l(l+1)}\hbar \qquad l = 0, 1, 2, \ldots, (n-1)$$

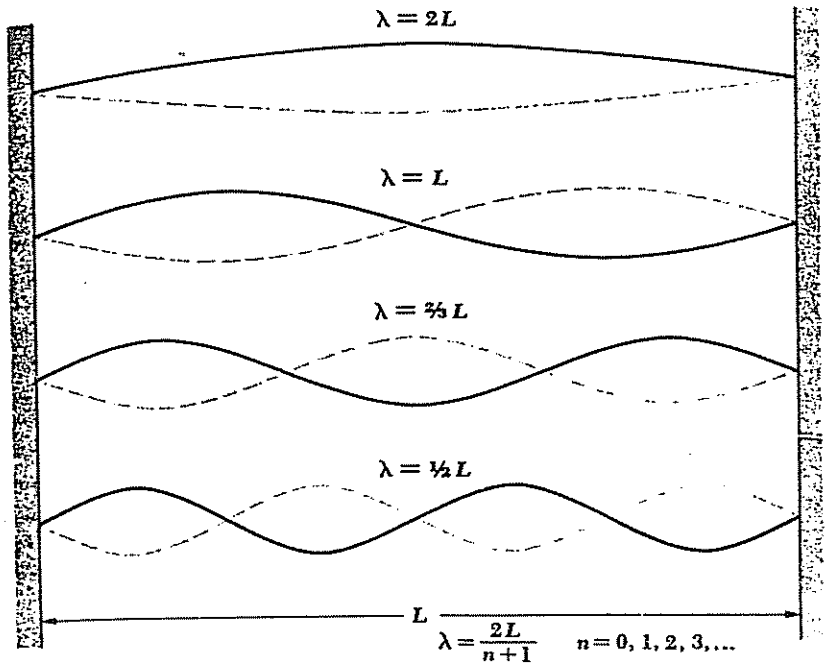


FIGURA 5-2 Ondas estacionarias en un hilo estirado sujeto por ambos extremos.

Por supuesto, una cantidad variable dinámica G puede no estar cuantizada. En ese caso, las mediciones de G efectuadas sobre un número de sistemas idénticos no conducirán a un resultado único, sino a un conjunto de valores cuyo promedio es el valor probable

$$\langle G \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} G|\psi|^2\, dx$$

Por ejemplo, en el átomo de hidrógeno la posición del electrón no está cuantizada, de tal forma que debemos pensar que el electrón tiene cierta probabilidad $|\psi|^2$ por unidad de volumen de encontrarse en una región vecina al núcleo, pero con una posición y aun una órbita no predecibles en el sentido clásico. La afirmación de la probabilidad no entra en conflicto con el hecho de que los experimentos llevados a cabo con el átomo de hidrógeno muestran siempre que éste contiene un electrón completo, no el 27% de un electrón en determinada región y el 73% en otra parte; la probabilidad se refiere a la posibilidad de *encontrar* al electrón y si bien esta probabilidad está esparcida en el espacio, el electrón no lo está.

www.elsolucionario.org

5.6 PARTICULA EN UNA CAJA: CUANTIZACION DE LA ENERGIA

Resolver la ecuación de Schrödinger, aun en su forma de estado estacionario más simple, requiere comúnmente complicadas técnicas matemáticas. Por esta razón, el estudio de la mecánica cuántica se ha reservado tradicionalmente a estudiantes adelantados que tienen la preparación matemática adecuada. Sin embargo, ya que la mecánica cuántica es el esquema teórico cuyos resultados están más próximos a la realidad experimental, debemos explorar sus métodos y aplicaciones si queremos comprender algo de la física moderna. Como veremos todavía, una perspectiva matemática relativamente limitada es suficiente para que sigamos la secuencia de razonamientos que han conducido a la mecánica cuántica a sus logros más importantes.

Nuestro primer problema al utilizar la ecuación de Schrödinger es el de una partícula que rebota de un lado al otro entre las paredes de una caja (Fig. 5-3). El interés de este problema es triple: ver cómo la ecuación de Schrödinger se resuelve cuando el movimiento de una partícula está sujeta a restricciones; aprender las propiedades características de las soluciones de esta ecuación, como la limitación de la energía de la partícula solamente a algunos valores específicos; y finalmente comparar las predicciones de la mecánica cuántica con los de la mecánica newtoniana.

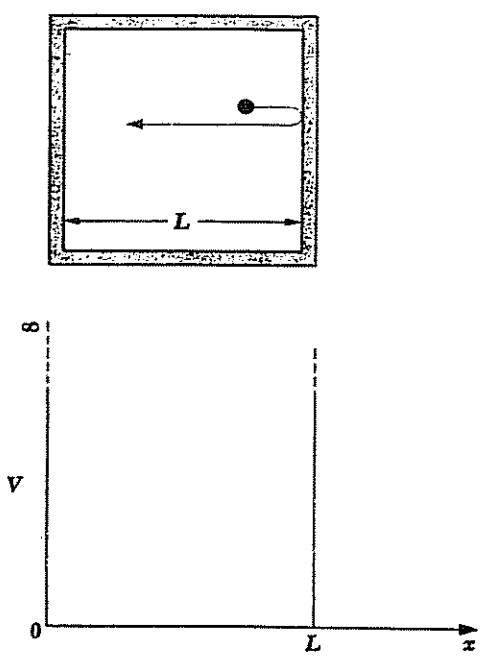


FIGURA 5-3 Partícula confinada en una caja de anchura L.

Podemos especificar el movimiento de la partícula diciendo que está restringida a viajar a lo largo del eje x entre $x=0$ y $x=L$ por paredes infinitamente duras. Una partícula no pierde energía cuando choca contra estas paredes, de modo que su energía total permanece constante. Desde el punto de vista formal de la mecánica cuántica, la energía potencial V de la partícula es infinita a ambos lados de la caja, mientras que V es constante —por conveniencia igual a 0— en el interior. Ya que la partícula no puede tener una cantidad infinita de energía, no puede existir fuera de la caja, y así su función de onda ψ es 0 para $x \leqslant 0$ y $x \geqslant L$. Nuestra misión es encontrar el valor de ψ dentro de la caja, es decir, entre $x = 0$ $x = L$.

Dentro de la caja, la ecuación de Schrödinger se convierte en:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \tag{5.25}$$

ya que allí $V = 0$ (La derivada total $d^2\psi/dx^2$ es igual que la derivada parcial $\partial^2\psi/\partial x^2$ porque ψ es una función únicamente de x en este problema.) La Ec. 5.25 tiene dos soluciones posibles

$$\psi = A \operatorname{sen}\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x \tag{5.26}$$

$$\psi = B \cos\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x \tag{5.27}$$

que podemos comprobar por sustitución de la Ec. 5.25: su suma es también una solución. A y B son constantes que se deberán calcular.

Estas soluciones están sujetas a la importante condición frontera de que $\psi = 0$ para $x = 0$ y para $x = L$. Puesto que cos 0 = 1, la segunda solución no puede describir a la partícula, porque no permite que para $x = 0$ sea $\psi = 0$.De aquí se concluye que $B = 0$. Ya que sen 0 = 0, la primera solución da siempre para $\psi = 0$, como se requiere, pero ψ será 0 para $x = L$ solamente cuando

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}L = \pi, 2\pi, 3\pi, \ldots = n\pi \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{5.28}$$

Esto sucede porque los senos de los ángulos π, 2π, 3π, . . . son todos igual a 0.

De la Ec. 5.28 se ve claramente que la energía de la partícula puede tener solamente ciertos valores. Estos valores, que constituyen los *niveles de energía* del sistema, son

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{5.29}$$

Partícula en una caja

El número entero n, que corresponde al nivel de energía E_n, es llamado su *número cuántico*. Una partícula en el interior de una caja no puede tener una

energía arbitraria: el hecho de estar confinada da lugar a restricciones en su función de onda que le permiten tener solamente las energías determinadas mediante la Ec. 5.29.

Es significativo que la partícula no pueda tener energía cero; si la tuviera, la función de onda ψ tendría que ser cero en cualquier lugar de la caja y esto significa que la partícula no podría estar allí presente. La exclusión de $E = 0$ como un valor posible para la energía de una partícula encerrada, lo mismo que la limitación de E a un conjunto discreto de valores definidos, es un resultado de la mecánica cuántica que no tiene contrapartida en la mecánica clásica, donde todas las energías, incluyendo la cero, son posibles.

El principio de incertidumbre confirma que $E = 0$ es inadmisible. Debido a que la partícula está confinada a la caja, la incertidumbre de su posición es $\Delta x = L$, que es la anchura de la caja. La incertidumbre de su momentum es, en consecuencia,

$$\Delta p \geqslant \frac{\hbar}{L}$$

que no es compatible con $E = 0$. Vemos que el momentum correspondiente a E_1, ya que la energía de la partícula es completamente cinética, es,

$$p_1 = \pm\sqrt{2mE_1} = \pm\frac{\pi\hbar}{L}$$

que concuerda con el principio de incertidumbre.

¿Por qué en nuestra propia experiencia no vemos la cuantización de la energía? Con toda seguridad, una bola que rueda de un lado a otro entre los lados de una caja nivelada con suelo liso puede tener cualquier velocidad y, como consecuencia, cualquier energía que queramos darle, incluyendo la cero. Para asegurarnos de que la Ec. 5.29 no discrepa con nuestras observaciones directas y, en cambio, proporciona aspectos especiales en la escala microscópica, calculemos los niveles de energía permitidos para: (1) un electrón en una caja de 1 Å de ancho y (2) para una bola de 10 g, en una caja de 10 cm.

En el caso 1 tenemos que $m = 9.1 \times 10^{-31}$ kg y $L = 1\,\text{Å} = 10^{-10}$ m, de modo que las energías permitidas al electrón son

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{n^2 \times \pi^2 \times (1.054 \times 10^{-34}\ \text{J-s})^2}{2 \times 9.1 \times 10^{-31}\ \text{kg} \times (10^{-10}\ \text{m})^2} \\ &= 6.0 \times 10^{-18} n^2\ \text{J} \\ &= 38 n^2\ \text{eV} \end{aligned}$$

La energía mínima que el electrón puede tener es 38 eV, correspondiente a $n = 1$. Las secuencia de niveles de energía continúa con $E_2 = 152$ eV, $E_3 = 342$ eV, $E_4 = 608$ eV, y así sucesivamente (Fig. 5-4). Estos niveles de energía están lo suficientemente separados como para hacer notable la cuantización de la energía del electrón en la caja, si realmente existiera esa caja.

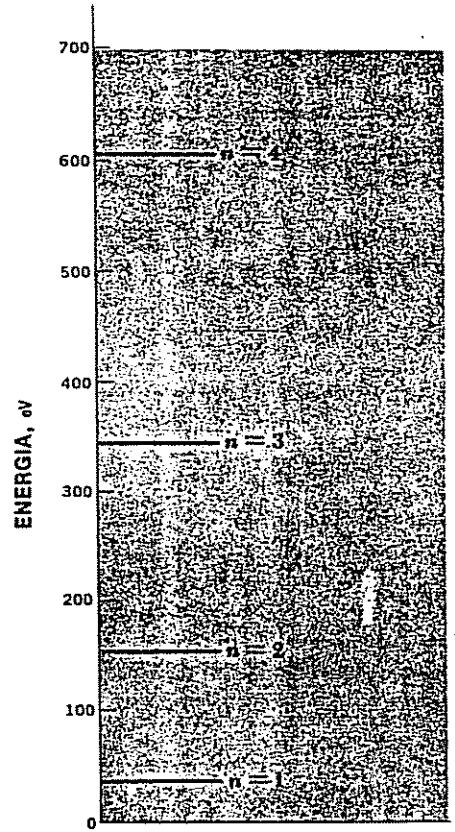


FIGURA 5-4 Niveles de energía de un electrón confinado en una caja de 1 Å de anchura.

En el caso 2 tenemos $m = 10\,\text{g} = 10^{-2}$ kg y $L = 10\,\text{cm} = 10^{-1}$ m, de modo que las energías de la bola permitidas son

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{n^2 \times \pi^2 \times (1.054 \times 10^{-34}\ \text{J-s})^2}{2 \times 10^{-2}\ \text{kg} \times (10^{-1}\ \text{m})^2} \\ &= 5.5 \times 10^{-64} n^2\ \text{J} \end{aligned}$$

La energía mínima que puede tener la bola es 5.5×10^{-64} J, que corresponde a $n = 1$. Una bola con esta energía cinética tiene una velocidad de solamente 3.3×10^{-31} m/s y, por lo tanto, no se puede distingir experimentalmente de una bola inmóvil. Una velocidad razonable que puede tener una bola es 1/3 m/s, ¡que corresponde al nivel de energía de número cuántico $n = 10^{30}$! Los niveles de energía permitidos son tan próximos entre sí que no hay manera de determinar si la bola puede tener solamente las energías dadas por la Ec. 5.29 o cualquier otra. Por tanto, en el campo de la experiencia cotidiana, los efectos cuánticos son imperceptibles; esto explica el éxito de la mecánica newtoniana en este campo.

5.7 LA PARTICULA EN UNA CAJA: LAS FUNCIONES DE ONDA

En la sección anterior encontramos que la función de onda de una partícula de energía E en una caja es

$$\psi = A \operatorname{sen} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x$$

ya que las energías posibles son

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

sustituyendo E_n por E se obtiene

5.30 $$\psi_n = A \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}$$

para las funciones de onda características correspondientes a los valores característicos de energía E_n.

Es fácil comprobar que estas funciones de onda reúnen todos los requisitos que hemos discutido: para cada número cuántico n, ψ_n es una función de x de un solo valor, y ψ_n y $\partial\psi_n/\partial x$ son continuas. Además, la integral de $|\psi_n|^2$ en todo el espacio es finita, como podemos ver integrando $|\psi_n|^2\,dx$ entre $x = 0$ y $x = L$ (ya que la partícula, por hipótesis, está confinada dentro de esos límites):

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2\,dx = \int_0^L |\psi_n|^2\,dx$$

$$= A^2 \int_0^L \operatorname{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$

5.31 $$= A^2 \frac{L}{2}$$

Para normalizar ψ debemos asignar a B un valor, de manera que $|\psi_n|^2$ sea *igual* a la probabilidad $P\,dx$ de encontrar la partícula entre x y $x + dx$, en vez de ser meramente proporcional a P. Si $|\psi_n|^2$ es igual a P, debe ser cierto que

5.32 $$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2\,dx = 1$$ Normalización

ya que

$$\int_{-\infty}^{\infty} P\,dx = 1$$

que es la manera matemática de establecer que la partícula existe en alguna parte en todo instante. Comparando las Ecs. 5.31 y 5.32, vemos que las funciones de onda de una partícula en una caja estarán normalizadas si

5.33 $$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Las funciones de onda normalizadas de una partícula son, por tanto.

5.34 $$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}$$

Las funciones de onda normalizadas ψ_1, ψ_2 y ψ_3, junto con las densidades de probabilidad $|\psi_1|^2$, $|\psi_2|^2$ y $|\psi_3|^2$, están representadas en la Fig. 5-5. Aunque ψ_n puede ser tanto positiva como negativa, $|\psi_n|^2$ siempre es positiva y, puesto que ψ_n está normalizada, su valor para una x dada es igual a la probabilidad P de encontrar allí a la partícula. En cada caso, $|\psi_n|^2 = 0$ para $x = 0$ y $x = L$, que son los límites de la caja. La probabilidad de que la partícula esté presente en un punto determinado de la caja puede ser muy diferente para números cuánticos distintos. Por ejemplo, $|\psi_1|^2$ tiene un valor máximo de $\frac{1}{2}L$ en el centro de la caja, mientras que allí $|\psi_2|^2 = 0$: una partícula en el nivel más bajo de energía $n = 1$ lo más probable es que esté en el centro de la caja, mientras que una partícula en el estado siguiente superior de $n = 2$ no está *nunca* allí. La física clásica

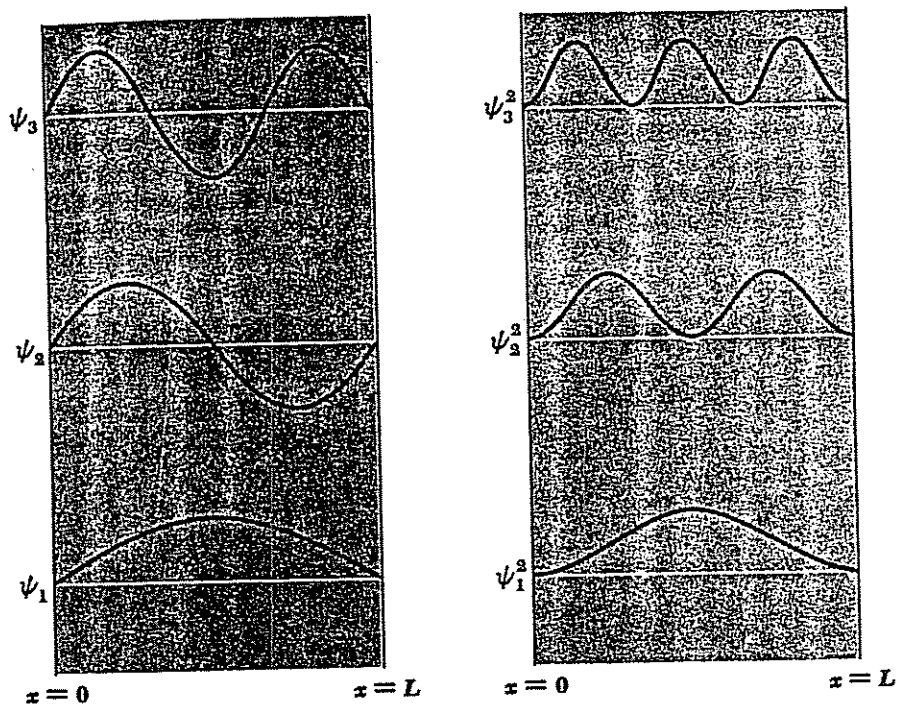


FIGURA 5-5 Funciones de onda y densidades de probabilidad de una partícula confinada en una caja de paredes rígidas.

www.elsolucionario.org

determina también la misma probabilidad para una partícula que esté en cualquier lado de la caja.

Las funciones de onda, que se presentan en la Fig. 5-5, recuerdan las vibraciones posibles de una cuerda sujeta por ambos extremos, como las del hilo estirado de la Fig. 5-2. Esto es una consecuencia del hecho de que las ondas en un hilo estirado y la onda que representa al movimiento de una partícula obedecen a ecuaciones de onda de la misma forma, de modo que cuando se ponen restricciones idénticas para cada clase de ondas, las soluciones son idénticas.

5.8 LA PARTICULA EN UNA CAJA NO RIGIDA

Es interesante resolver el problema de la partícula en una caja cuando las paredes no se consideran infinitamente rígidas. En este caso, la energía potencial V fuera de la caja es finita; la situación correspondiente, en el caso de una cuerda en vibración, supondría una unión imperfecta en los extremos del hilo, por lo que los extremos podrían moverse ligeramente. Este problema es más difícil de tratar y aquí se presentará simplemente el resultado. (Volveremos sobre este tema cuando examinemos la teoría del deuterón en el Cap. 11.)

Las primeras funciones de onda para una partícula en una caja de este tipo, se representan en la Fig. 5-6. Las funciones de onda ψ_n *no* son ahora igual a 0 fuera de la caja. Aun cuando la energía de la partícula sea más pequeña que el valor V exterior, existe una probabilidad finita de que sea encontrada fuera. En otras palabras, aunque la partícula no tenga energía suficiente para atravesar las paredes de la caja según el "sentido común", puede, sin embargo, penetrarla de

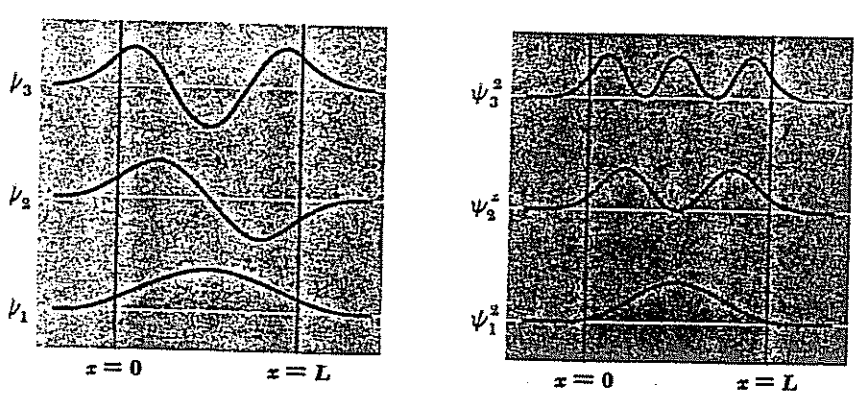


FIGURA 5-6 Funciones de onda y densidades de probabilidad de una partícula confinada en una caja de paredes no rígidas.

alguna manera. Esta situación singular es fácilmente comprensible en función del principio de incertidumbre. Como la incertidumbre Δp en el momentum de la partícula está relacionada con la incertidumbre Δx en su posición mediante la fórmula

$$\Delta p \, \Delta x \geqslant \hbar$$

una incertidumbre infinita en el momentum de la partícula fuera de la caja es el precio de establecer concretamente que la partícula no está nunca allí. Una partícula requiere una cantidad infinita de energía si su momentum tiene también una incertidumbre infinita, lo que implica que $V = \infty$ fuera de la caja. Si V tiene un valor finito, fuera de la caja, entonces existe una probabilidad —no necesariamente grande pero sí diferente de cero— de que la partícula "escape". Como se verá en el Cap. 12, la predicción de la mecánica cuántica de que las partículas tienen siempre alguna posibilidad de escapar del confinamiento (como las energías potenciales no son nunca infinitas en el mundo real, la caja original de paredes rígidas no tiene correspondencia física) se ajusta exactamente al comportamiento observado de los núcleos radiactivos que emiten partículas alfa.

Cuando las paredes de la caja no son rígidas, la función de onda de la partícula ψ_n no es igual a cero en las paredes. Las longitudes de onda de partículas que se pueden ajustar en la caja son algo más grandes que en el caso de la caja de paredes rígidas, correspondiente a momenta de las partículas más bajas y, por tanto, a niveles de energía inferiores.

La condición de que la energía potencial V fuera de la caja sea finita tiene otra consecuencia: ahora es posible que una partícula tenga una energía E que sea superior a V. Esta partícula no está encerrada dentro de la caja, ya que tiene siempre la energía suficiente para traspasar la pared, y su energía no está cuantizada, sino que puede tener cualquier valor por encima de V. No obstante, la energía cinética de la partícula fuera de la caja, $E - V$, es siempre menor que su energía cinética dentro de ella, que tiene el valor E, ya que $V = 0$, según se especificó originalmente. Una energía menor significa una longitud de onda mayor, de modo que ψ tiene una longitud de onda mayor fuera que dentro de la caja.

En la óptica de ondas luminosas se observa fácilmente que cuando una onda alcanza una región donde su longitud de onda cambia (esto es, una región de diferente índice de refracción) se produce una reflexión y una trasmisión. Este es el motivo por el que nos vemos reflejados en una vitrina. El efecto es común a todo tipo de ondas y se puede demostrar matemáticamente a partir de la exigencia de que la variable de onda (intensidad del campo eléctrico E en el caso de ondas electromagnéticas, presión p en el de ondas sonoras, altura h en el caso de ondas de agua, etc.) y su primera derivada son continuas en la frontera donde tiene lugar el cambio de longitud de onda.

Exactamente las mismas consideraciones se aplican a la función de onda ψ que representa a una partícula en movimiento. La función de onda de una

partícula que llega a una región donde tiene una energía potencial diferente, como lo vimos anteriormente, disminuye en longitud de onda si V disminuye, y aumenta si V aumenta. Siempre se produce alguna reflexión en la frontera de las dos regiones. ¿Qué significa "alguna" reflexión al hablar del movimiento de una partícula única? Puesto que ψ está relacionado con la probabilidad de encontrar la partícula en un lugar determinado, la reflexión parcial de ψ significa que hay una posibilidad de que la partícula sea reflejada. Esto es, si nosotros lanzamos muchas partículas a una caja de paredes no rígidas, la mayor parte pasarán, pero algunas serán dispersadas.

Lo que decimos, entonces, es que las partículas que tienen una energía suficiente para traspasar una pared tienen, sin embargo, alguna probabilidad de rebotar. Esta predicción complementa el "escape" de las partículas encerradas en la caja, a pesar de que tengan energía suficiente para atravesar sus paredes. Ambas conclusiones son exclusivas de la mecánica cuántica y no tienen correspondencia con ningún comportamiento esperado en la física clásica. Su confirmación en numerosos experimentos atómicos y nucleares supone la validez de la perspectiva mecánico-cuántica.

5.9 EL OSCILADOR ARMONICO

Se dice que existe movimiento armónico cuando un sistema cualquiera vibra alrededor de una configuración de equilibrio. El sistema puede ser un objeto soportado por un resorte o flotante en un líquido, una molécula diatómica, un átomo en una red cristalina hay innumerables ejemplos en el mundo macroscópico y microscópico. La condición necesaria para que exista un movimiento armónico es la presencia de una fuerza restauradora que actúe llevando al sistema, cuando se altere, a su configuración de equilibrio; la inercia de las masas del sistema les obliga a sobrepasar el equilibrio, y el sistema oscilará indefinidamente si no hay ningún proceso de disipación.

En el caso especial de un movimiento armónico simple, la fuerza recuperadora F sobre una partícula de masa m es lineal; es decir, F es proporcional al desplazamiento x de la partícula de su posición de equilibrio, de manera que

5.35 $$F = -kx$$

A esta relación se la conoce normalmente como ley de Hooke. De acuerdo con la segunda ley del movimiento, $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$, y así

$$-kx = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

5.36 $$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{k}{m}x = 0$$

Existen diversos modos de expresar la solución de la Ec. 5.36, siendo un camino conveniente

5.37 $$x = A\cos(2\pi\nu t + \phi)$$

donde

5.38 $$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$$

es la frecuencia de la oscilación, A su amplitud, y ϕ, el ángulo de fase, es una constante que depende del valor de x en el tiempo $t = 0$.

La importancia del oscilador armónico simple, tanto en la física clásica como en la moderna, no reside en una adhesión estricta de las fuerzas restauradoras a la ley de Hooke, que es raramente cierta, sino en el hecho de que estas fuerzas siguen dicha ley para pequeños valores de x. Para apreciar este punto, observemos que cualquier fuerza que sea una función de x se puede expresar mediante una serie de Maclaurin alrededor de la posición de equilibrio $x = 0$ como

$$F(x) = F_{x=0} + \left(\frac{dF}{dx}\right)_{x=0} x + \frac{1}{2}\left(\frac{d^2F}{dx^2}\right)_{x=0} x^2 + \frac{1}{6}\left(\frac{d^3F}{dx^3}\right)_{x=0} x^3 + \cdots$$

Puesto que $x = 0$ es la posición de equilibrio, $F_{x=0} = 0$, y como cuando x es pequeña los valores de x^2, x^3, . . . son muy pequeños comparados con x, los términos a partir del tercero de la serie se pueden ignorar. El único término significativo, cuando x es pequeña, es, por tanto, el segundo. De aquí que

$$F(x) = \left(\frac{dF}{dx}\right)_{x=0} x$$

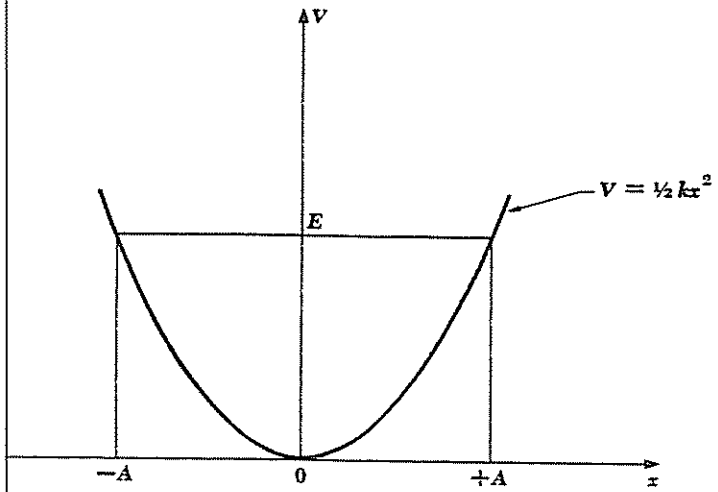
que es la ley de Hooke cuando $(dF/dx)_{x=0}$ es negativo, lo que ocurre lógicamente con cualquier fuerza restauradora. Así, la conclusión es que *todas* las oscilaciones tienen carácter armónico simple cuando sus amplitudes son suficientemente pequeñas.

La energía potencial $V(x)$ que corresponde a una fuerza que cumple la ley de Hooke se puede hallar calculando el trabajo necesario para llevar a una partícula desde $x = 0$ a $x = x$ contra dicha fuerza. El resultado es

5.39 $$V(x) = -\int_0^x F(x)\,dx = k\int_0^x x\,dx = \tfrac{1}{2}kx^2$$

que se representa en la Fig. 5-7. Si la energía del oscilador es E, la partícula vibra entre $x = -A$ y $x = +A$, donde E y A están relacionados mediante $E = \frac{1}{2}kA^2$.

Aun antes de hacer un cálculo detallado, podemos anticipar tres modificaciones mecanocuánticas a esta descripción clásica. Primero, no habrá un espectro continuo de energías permitidas, sino un espectro discreto de energías, constituido únicamente por ciertos valores determinados. Segundo, la



FIGURAS 5-7 La energía potencial de un oscilador armónico es proporcional a x^2, siendo x el desplazamiento desde la posición de equilibrio. La amplitud A del movimiento se determina por la energía total E del oscilador que en mecánica clásica puede tener cualquier valor.

energía más baja permitida no será $E = 0$, sino un valor mínimo definido, $E = E_0$. Tercero, habrá una cierta probabilidad de que la partícula pueda "atravesar" la barrera de potencial, esto es, salir de los límites de $-A$ y $+A$.

Los resultados reales concuerdan con los esperados. Los niveles de energía de un oscilador armónico, cuya frecuencia de oscilación clásica es ν (dada por la Ec. 5.38), resulta dada por la fórmula

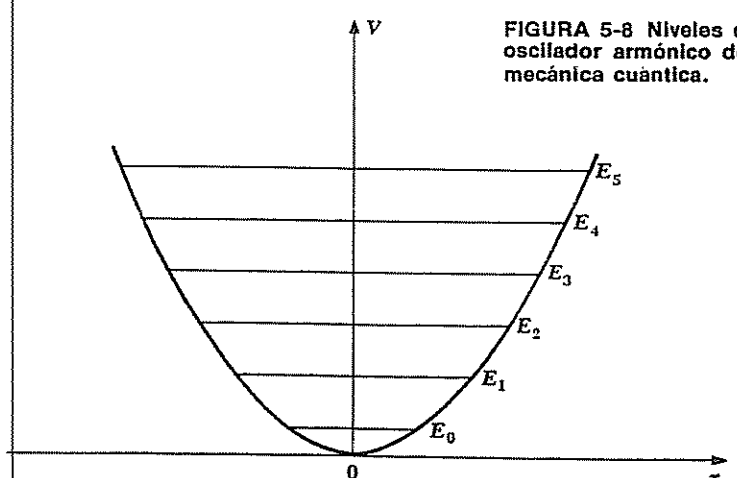


FIGURA 5-8 Niveles de energía de un oscilador armónico de acuerdo con la mecánica cuántica.

5.40 $$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$ Niveles de energía de un oscilador armónico

La energía de un oscilador armónico está cuantizada en pasos de $h\nu$. Aquí, los niveles de energía están ligeramente espaciados (Fig. 5-8) a diferencia de los niveles de energía de una partícula en una caja cuyo espaciamiento es divergente. Notemos que, cuando $n = 0$,

5.41 $$E_0 = \tfrac{1}{2}h\nu$$ Energía del punto cero

que es el valor más bajo de energía que puede tener el oscilador. Este valor recibe el nombre de *energía del punto cero* porque un oscilador armónico en

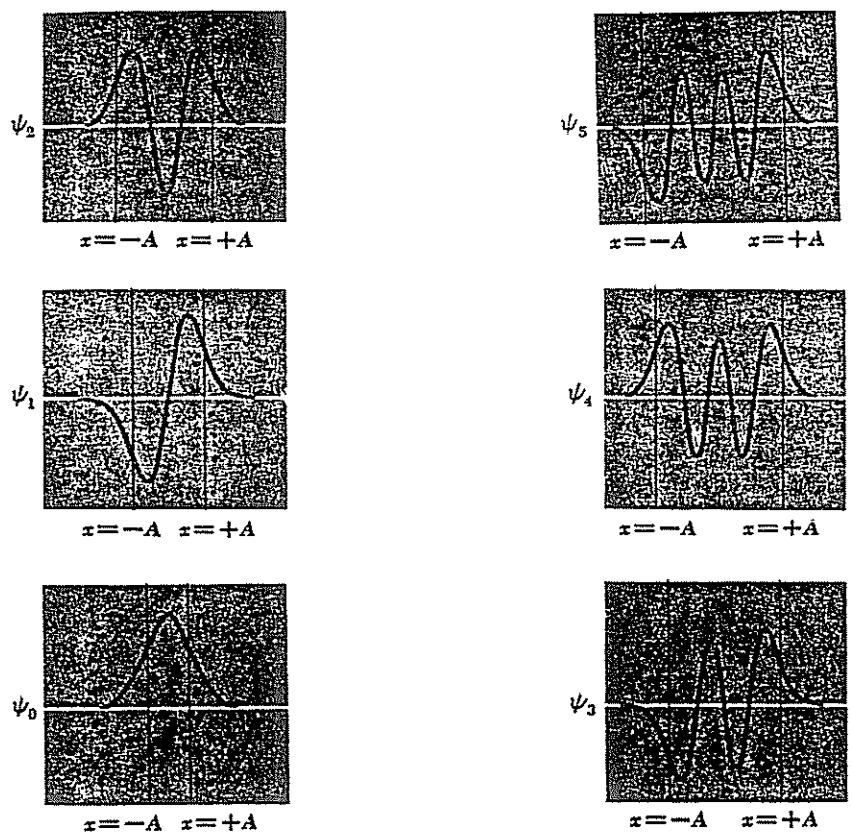


FIGURA 5-9 Las seis primeras funciones de onda del oscilador armónico. Las líneas verticales muestran los límites $-A$ y $+A$ entre los que vibraría un oscilador clásico con la misma energía.

www.elsolucionario.org

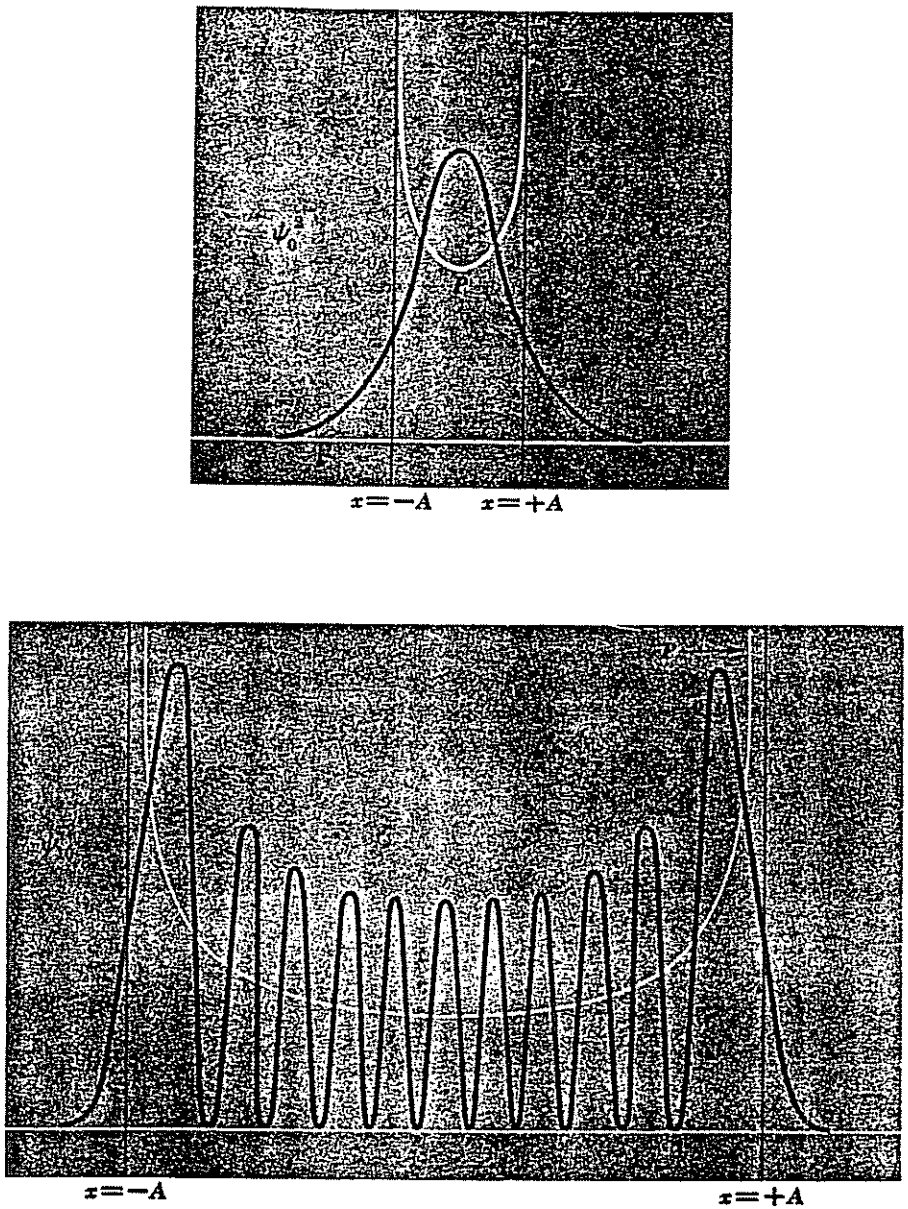


FIGURA 5-10 Densidad de probabilidad para los estados $n=0$ y $n=10$ de un oscilador armónico cuántico. También se muestran en la figura las densidades de probabilidad de un oscilador armónico clásico con las mismas energías.

equilibrio con sus alrededores se aproximará a una energía $E = E_0$ y no a $E = 0$ a medida que la temperatura se aproxime a 0° K.

En la Fig. 5-9 se muestran las funciones de onda correspondientes a los cinco primeros niveles de energía de un oscilador armónico. En cada caso se indica el margen donde debe ser confinada una partícula que oscile clásicamente con la misma energía total E_n; evidentemente, la partícula puede penetrar en regiones prohibidas de acuerdo con el método clásico —en otras palabras, puede exceder la amplitud A determinada por la energía— con una probabilidad que decrece en forma exponencial, como ocurre en la situación de una caja con paredes no rígidas.

Es interesante e instructivo comparar las densidades de probabilidad de un oscilador armónico clásico y un oscilador armónico cuántico de la misma energía. La gráfica superior de la Fig. 5-10 muestra la densidad en el caso del oscilador clásico: la probabilidad P de encontrar la partícula en una posición dada es máxima en los puntos extremos de su movimiento, donde se mueve lentamente, y mínima cerca de la posición de equilibrio ($x=0$), donde se mueve con rapidez. Un oscilador cuántico manifiesta un comportamiento exactamente opuesto en su estado de energía más bajo de $n=0$. Como se indica, la densidad de probabilidad ψ_0^2 tiene su valor máximo en $x=0$ y decrece a cada lado de esta posición. Sin embargo, esta discrepancia se aprecia cada vez menos a medida que aumenta n. La gráfica inferior de la Fig. 5-10 corresponde a $n=10$, y es evidente que cuando se promedia ψ_{10}^2 sobre x tiene aproximadamente el carácter general de la probabilidad clásica P. Este es otro ejemplo del principio de correspondencia mencionado en la Sec. 4.11: en el límite de números cuánticos grandes, la física cuántica conduce a los mismos resultados que la física clásica.

Se puede objetar que, si bien $|\psi_{10}|^2$ se aproxima a P cuando se hace más plana, $|\psi_{10}|^2$ fluctúa rápidamente con x mientras que P no. Esta objeción tiene sentido únicamente si las fluctuaciones son observables y, cuanto menor es la distancia entre picos y valles, con mayor fuerza el principio de incertidumbre impide su detección sin alterar el estado físico del oscilador. Las "colas" exponenciales de $|\psi_{10}|^2$ sobre $x = \pm A$ también disminuyen cuando n aumenta. Así las representaciones clásicas y cuánticas se van pareciendo cada vez más a medida que aumenta el valor de n, de acuerdo con el principio de correspondencia, aunque sean radicalmente diferentes para valores pequeños de n.

• 5.10 EL OSCILADOR ARMONICO: LA SOLUCION DE LA ECUACION DE SCHRÖDINGER

En esta sección veremos cómo se lograron las conclusiones precedentes. La ecuación de Schrödinger de un oscilador armónico es, con $V = \frac{1}{2}kx^2$,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}kx^2\right)\psi = 0 \qquad 5.42$$

Es conveniente simplificar la Ec. 5.42 introduciendo las magnitudes adimensionales

$$y = \left(\frac{1}{\hbar}\sqrt{km}\right)^{1/2} x$$

5.43 $$= \sqrt{\frac{2\pi m\nu}{\hbar}}\, x$$

y

$$\alpha = \frac{2E}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{k}}$$

5.44 $$= \frac{2E}{h\nu}$$

donde ν es la frecuencia clásica de la oscilación dada por la Ec. 5.38. Al hacer estas sustituciones, lo que esencialmente hemos hecho ha sido cambiar las unidades en las que se expresaban x y E, metros y joules, respectivamente, a unidades más apropiadas, sin dimensiones. Expresando la ecuación de Schrödinger en función de y y α tenemos

5.45 $$\frac{d^2\psi}{dy^2} + (\alpha - y^2)\psi = 0$$

Para resolver la Ec. 5.45, determinamos la forma asintótica que debe tener ψ cuando $y \to \pm\infty$. Si toda función de onda ψ debe representar una partícula real localizada en el espacio, su valor se debe aproximar a 0 a medida que y se aproxime al infinito, de manera que $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2\, dy$ sea una cantidad finita y no nula. Volvamos a escribir la Ec. 5.45 como sigue:

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} - (y^2 - \alpha)\psi = 0$$

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} = (y^2 - \alpha)\psi$$

$$\frac{d^2\psi/dy^2}{(y^2 - \alpha)\psi} = 1$$

Cuando $y \to \infty$, $y^2 \gg \alpha$ y tenemos

5.46 $$\lim_{y\to\infty} \frac{d^2\psi/dy^2}{y^2\psi} = 1$$

Una funcion ψ_∞ que satisface la ecuación 5.46 es

5.47 $$\psi_\infty = e^{-y^2/2}$$

puesto que

$$\lim_{y\to\infty} \frac{d^2\psi_\infty}{dy^2} = \lim_{y\to\infty} (y^2 - 1)e^{-y^2/2} = y^2 e^{-y^2/2}$$

La Ec. 5.47 es la forma asintótica requerida para ψ.

Podemos ahora escribir

$$\psi = f(y)\psi_\infty$$

5.48 $$= f(y)e^{-y^2/2}$$

donde $f(y)$ es una función de y que se debe determinar. Sustituyendo la ψ de la Ec. 5.48 en la Ec. 5.45 obtenemos

5.49 $$\frac{d^2f}{dy^2} - 2y\frac{df}{dy} + (\alpha - 1)f = 0$$

que es la ecuación diferencial que cumple f.

El procedimiento normal para resolver ecuaciones diferenciales, como la de la Ec. 5.49, es suponer que $f(y)$ se puede desarrollar como una serie de potencias de y; es decir

$$f(y) = A_0 + A_1 y + A_2 y^2 + A_3 y^3 + \cdots$$

5.50 $$= \sum_{n=0}^{\infty} A_n y^n$$

y determinar así los valores de los coeficientes A_n. Derivando f se obtiene

$$\frac{df}{dy} = A_1 + 2A_2 y + 3A_3 y^2 + \cdots$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} nA_n y^{n-1}$$

Multiplicando esta ecuación por y obtenemos

$$y\frac{df}{dy} = A_1 y + 2A_2 y^2 + 3A_3 y^3 + \cdots$$

5.51 $$= \sum_{n=0}^{\infty} nA_n y^n$$

La segunda derivada de f con respecto a y es

$$\frac{d^2f}{dy^2} = 1 \cdot 2A_2 + 2 \cdot 3A_3 y + 3 \cdot 4A_4 y^2 + \cdots$$

$$= \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)A_n y^{n-2}$$

que es igual a

5.52 $$\frac{d^2f}{dy^2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1)A_{n+2}y^n$$

(Se puede comprobar que las dos últimas expresiones son realmente iguales determinando los primeros términos de cada serie.) Ahora, sustituyendo las Ecs. 5.50 a 5.52 en la Ec. 5.49, obtenemos

5.53 $$\sum_{n=0}^{\infty} [(n+2)(n+1)A_{n+2} - (2n+1-\alpha)A_n]y^n = 0$$

Para que esta ecuación sea válida para todos los valores de y, la expresión entre corchetes debe ser cero para cualquier valor de n. De aquí obtenemos la condición

$$(n+2)(n+1)A_{n+2} = (2n+1-\alpha)A_n$$

y así

5.54 $$A_{n+2} = \frac{2n+1-\alpha}{(n+2)(n+1)} A_n$$

Con esta *fórmula de recurrencia* podemos calcular los coeficientes A_2, A_3, $A_4, \ldots$ en función de A_0 y A_1. (Puesto que la Ec. 5.49 es una ecuación diferencial de segundo orden, sus soluciones tienen dos constantes arbitrarias, que aquí son A_0 y A_1.) Partiendo de A_0 obtenemos la secuencia de coeficientes $A_2, A_4, A_6, \ldots$, y partiendo de A_1, obtenemos $A_3, A_5, A_7, \ldots$.

Es necesario investigar el comportamiento de

$$\psi = f(y)e^{-y^2/2}$$

cuando $y \to \infty$; solamente si $\psi \to 0$ cuando $y \to \infty$ puede ser una función de onda físicamente aceptable. Debido a que $f(y)$ está multiplicada por $e^{-y^2/2}$, ψ cumplirá esta condición con tal que

$$\lim_{y\to\infty} f(y) < e^{y^2/2}$$

(Como veremos, no es necesario especificar cuánto más pequeño debe ser f en el límite que $e^{y^2/2}$.)

Un método adecuado para comparar el comportamiento asintótico de $f(y)$ y $e^{y^2/2}$ es expresar este último como una serie de potencias (f ya está en forma de serie de potencias) y examinar la razón entre los coeficientes sucesivos de cada una de las series a medida que $n \to \infty$. A partir de la fórmula de recurrencia de la Ec. 5.54, es evidente que

$$\lim_{n\to\infty} \frac{A_{n+2}}{A_n} = \frac{2}{n}$$

Puesto que

$$e^z = 1 + z + \frac{z^2}{2!} + \frac{z^3}{3!} + \cdots$$

podemos expresar $e^{y^2/2}$ como una serie de potencias como

$$e^{y^2/2} = 1 + \frac{y^2}{2} + \frac{y^4}{2^2 \cdot 2!} + \frac{y^6}{2^3 \cdot 3!} + \cdots$$

$$= \sum_{n=0,2,4,\ldots}^{\infty} \frac{1}{2^{n/2}\left(\frac{n}{2}\right)!} y^n$$

$$= \sum_{n=0,2,4,\ldots}^{\infty} B_n y^n$$

La razón entre los coeficientes sucesivos de y^n es aquí

$$\frac{B_{n+2}}{B_n} = \frac{2^{n/2}\left(\frac{n}{2}\right)!}{2^{(n+2)/2}\left(\frac{n+2}{2}\right)!} = \frac{2^{n/2}\left(\frac{n}{2}\right)!}{2 \cdot 2^{n/2}\left(\frac{n}{2}+1\right)\left(\frac{n}{2}\right)!}$$

$$= \frac{1}{2\left(\frac{n}{2}+1\right)} = \frac{1}{n+2}$$

En el límite cuando $n \to \infty$, esta razón se convierte en

$$\lim_{n\to\infty} \frac{B_{n+2}}{B_n} = \frac{1}{n}$$

Así, los coeficientes sucesivos en la serie de potencias de f disminuyen *menos* rápidamente que los de la serie de potencias de $e^{y^2/2}$ en vez de *más* rápidamente, lo que significa que $f(y)e^{-y^2/2}$ no se anula cuando $y \to \infty$.

Existe un método sencillo para resolver este dilema. Si la serie que representa f termina en un cierto valor de n, de manera que todos los coeficientes A_n sean cero para valores de n mayores que éste, ψ tenderá a cero cuando $y \to \infty$ a causa del factor $e^{-y^2/2}$. En otras palabras, si f es un polinomio con un número finito de términos, en lugar de una serie infinita, entonces es aceptable. De la fórmula de recurrencia

$$A_{n+2} = \frac{2n+1-\alpha}{(n+2)(n+1)} A_n$$

www.elsolucionario.org

está claro que si

5.55 $$\alpha = 2n + 1$$

para cualquier valor de n, entonces $A_{n+2} = A_{n+4} = A_{n+6} = \cdots = 0$, que es lo que queríamos determinar.

(La Ec. 5.55 tiene en cuenta solamente una secuencia de coeficientes, ya sea la secuencia de valores pares de n que comienza con A_0, o la secuencia de valores impares de n que parte de A_1. Si n es par, se debe cumplir que $A_1 = 0$ y solamente aparecen en el polinomio las potencias pares de y, mientras que si n es impar, se debe cumplir que $A_0 = 0$, y solamente aparecen las potencias impares de y. Veremos el resultado en esta sección, donde el polinomio está tabulado para diversos valores de n.)

La condición $\alpha = 2n + 1$ es la condición necesaria y suficiente para que la Ec. de onda 5.45 tenga soluciones que satisfagan las diversas exigencias que debe cumplir ψ. De la definición de α, Ec. 5.44, tenemos que

$$\alpha_n = \frac{2E}{h\nu} = 2n + 1$$

o

5.56 $$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Esta es la fórmula dada como Ec. 5.40 en la sección anterior.

Para cada elección de parámetro α_n existe una función de onda ψ_n diferente. Cada función consta de un polinomio $H_n(y)$ (llamado *polinomio de Hermite*) con potencias pares o impares de y, del factor exponencial $e^{-y^2/2}$, y de un coeficiente numérico que es necesario para que ψ_n cumpla la condición de normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 \, dy = 1 \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

La fórmula general para la n-ésima función de onda es

5.57 $$\psi_n = \left(\frac{2m\nu}{\hbar}\right)^{1/4} (2^n n!)^{-1/2} H_n(y) e^{-y^2/2}$$

Tabla 5.1

ALGUNOS POLINOMIOS DE HERMITE

n	$H_n(y)$	α_n	E_n
0	1	1	$\frac{1}{2}h\nu$
1	$2y$	3	$\frac{3}{2}h\nu$
2	$4y^2 - 2$	5	$\frac{5}{2}h\nu$
3	$8y^3 - 12y$	7	$\frac{7}{2}h\nu$
4	$16y^4 - 48y^2 + 12$	9	$\frac{9}{2}h\nu$
5	$32y^5 - 160y^3 + 120y$	11	$\frac{11}{2}h\nu$

Los seis primeros polinomios de Hermite $H_n(y)$ están tabulados en la Tabla 5-1 y sus correspondientes funciones de onda ψ_n se representan en las Figs. 5-9 y 5-10 de la sección anterior.

Problemas

1. Verificar que todas las soluciones de la ecuación de onda

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$

deben ser de la forma $y = F(t \pm x/v)$ como se afirma en la Sec. 5.2.

2. Si $\Psi_1(x,t)$ y $\Psi_2(x,t)$ son soluciones de la ecuación de Schrödinger para un potencial dado $V(x)$, demostrar que la combinación lineal

$$\Psi = a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2$$

en la que a_1 y a_2 son constantes arbitrarias es también una solución. (Este resultado concuerda con la observación empírica de la interferencia de ondas de De Broglie, por ejemplo, en el experimento de Davisson-Germer que se estudia en el capítulo 3.)

3. Hallar la energía más baja de un neutrón confinado en una caja de 10^{-14}m de largo. (El tamaño del núcleo es de este orden de magnitud.)

4. De acuerdo con el principio de correspondencia, la teoría cuántica daría en el límite, para números cuánticos grandes, los mismos resultados que la física clásica. Demostrar que, cuando $n \to \infty$, la probabilidad de encontrar una partícula atrapada en una caja entre x y $x+dx$ es independiente de x, que es lo que daría la teoría clásica.

5. Encontrar la energía del punto 0 en eV de un péndulo cuyo periodo es 1 seg.

6. Una propiedad importante de las eigenfunciones de un sistema es que son ortogonales entre sí, lo cual significa que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \psi_m \, dV = 0 \qquad n \neq m$$

Verificar estas relaciones para la eigenfunciones de una partícula en una caja de una dimensión, con ayuda de la relación sen $\theta = (e^{i\theta} - e^{-i\theta})/2i$.

*7. Demostrar que los valores esperados $\langle T \rangle$ y $\langle V \rangle$ de las energías cinética y potencial de un oscilador armónico están dados por $\langle T \rangle = \langle V \rangle = E_0/2$ cuando

se encuentra en el estado $n=0$. (De hecho, esto es cierto para todos los estados de un oscilador armónico.) ¿Cómo se comparan estos resultados con los valores clásicos de T y V?

*8. A partir del hecho de que $\alpha \geqslant 0$ (puesto que $E \geqslant 0$) demostrar que los coeficientes A_n de la Ec. 5.50 son todos cero para valores negativos de n.

*9. Demostrar que las tres primeras funciones de onda de un oscilador armónico son soluciones normalizadas de la ecuación de Schrödinger.

10. De acuerdo con la física clásica elemental, la energía total de un oscilador armónico de masa m, frecuencia ν y amplitud A es $2\pi^2A^2\nu^2m$. Utilice el principio de incertidumbre para comprobar que la mínima energía posible del oscilador es $h\nu/2$, considerando que $\Delta x = A$.

11. ¿Cuál de las funciones de onda indicadas en la Fig. 5-11 se puede concebir con significación física?.

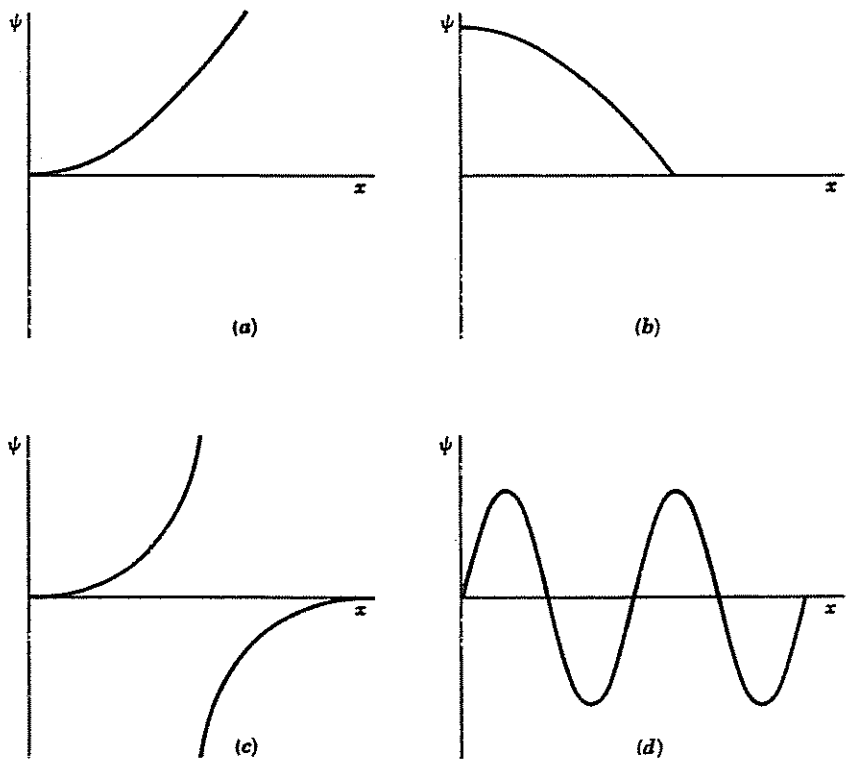


FIGURA 5-11

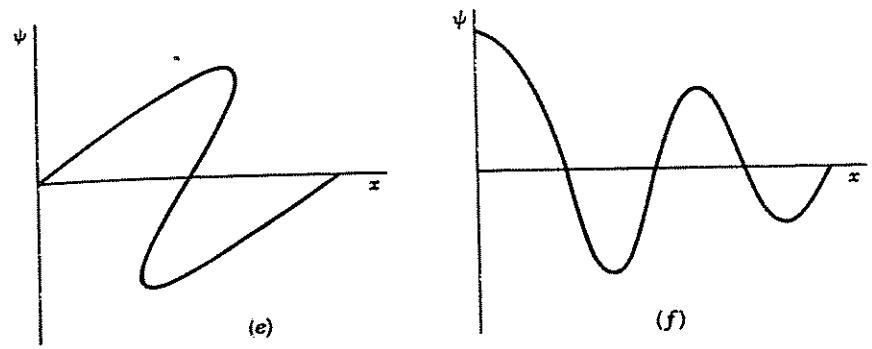


FIGURA 5-11 (Continuación)

LA TEORIA CUANTICA DEL ATOMO DE HIDROGENO 6

La teoría mecánico-cuántica del átomo, que se desarrolló poco después de la formulación de la mecánica cuántica, representa una contribución trascendental para el conocimiento del universo físico. A la vez que cambia nuestro conocimiento de los fenómenos atómicos, esta teoría ha permitido comprender, por ejemplo, cómo interactúan entre sí los átomos para formar moléculas estables, el origen del sistema periódico de los elementos, y el porqué los sólidos tienen propiedades eléctricas, magnéticas y mecánicas características. Todo ello será examinado en los siguientes capítulos. Por el momento, nos centraremos en la teoría cuántica del átomo de hidrógeno y de cómo se pueden interpretar los resultados matemáticos en función de conceptos conocidos.

6.1 ECUACION DE SCHRÖDINGER PARA EL ATOMO DE HIDROGENO

Un átomo de hidrógeno está formado por un protón, partícula que tiene carga eléctrica $+e$, y un electrón, que tiene una carga $-e$ y que es 1,836 veces más ligero que el protón. Por conveniencia, consideraremos el protón en estado estacionario y que el electrón se mueve a su alrededor, pero sin posibilidad de escapar debido al campo eléctrico del protón. (Como en el caso de la teoría de Bohr, la corrección para el movimiento del protón simplemente se obtiene al sustituir la masa m del electrón por la masa reducida m'.) La ecuación de Schrödinger para el electrón en tres dimensiones, que es la que debemos emplear para el átomo de hidrógeno, es

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0 \tag{6.1}$$

www.elsolucionario.org

La energía potencial V, a causa de la energía potencial electrostática de una carga $-e$ a una distancia r de otra carga $+e$, es

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \tag{6.2}$$

Puesto que V es una función de r en vez de serlo de x,y,z, no podemos sustituir la Ec. 6.2 directamente en la Ec. 6.1. Hay dos posibilidades: expresar V en función de las coordenadas cartesianas x,y,z sustituyendo a r por $\sqrt{x^2+y^2+z^2}$, o expresar la ecuación de Schrödinger en función de las coordenadas polares esféricas r, θ, ϕ definidas en la Fig. 6-1. Haciendo esto último debido a la simetría de la situación física, el problema se simplifica considerablemente.

Las coordenadas polares esféricas r, θ, ϕ del punto P de la Fig. 6-1 tienen la siguiente interpretación:

r = longitud del radio vector desde el origen O al punto P

$= \sqrt{x^2+y^2+z^2}$

θ = ángulo entre el radio vector y el eje $+z$

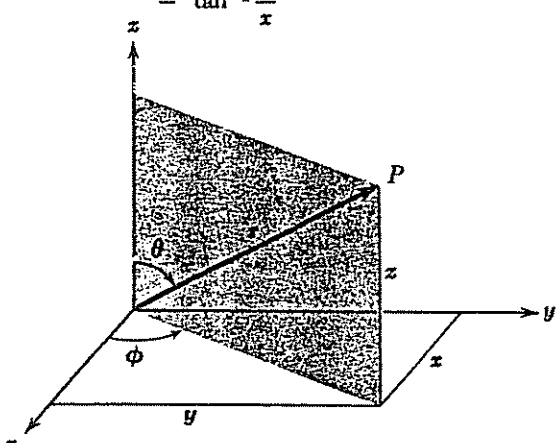
= ángulo cenital

$= \cos^{-1}\dfrac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$ Coordenadas polares esféricas

ϕ = ángulo entre la proyección del radio vector en el plano xy y el eje $+x$ medido en el sentido señalado

= ángulo azimutal

$= \tan^{-1}\dfrac{y}{x}$



$x = r\,\text{sen}\,\theta\cos\phi$
$y = r\,\text{sen}\,\theta\,\text{sen}\,\phi$
$z = r\cos\theta$

FIGURA 6-1 Coordenadas polares esféricas.

Sobre la superficie de una esfera cuyo centro está en O, las líneas de un ángulo cenital constante θ son como los paralelos de latitud sobre un globo (notemos que el valor de θ de un punto *no* es lo mismo que su latitud; $\theta = 90°$ está en el ecuador de la esfera, por ejemplo, pero la latitud geográfica del ecuador es 0°), y las líneas del ángulo de azimut constante ϕ son como meridianos de longitud (aquí las definiciones coinciden si se toma como eje del globo al eje $+z$ y el eje $+x$ está en $\phi = 0°$).

En coordenadas polares esféricas, la ecuación de Schrödinger es

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\,\text{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\text{sen}\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\text{sen}^2\,\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi = 0 \tag{6.3}$$

Sustituyendo la energía potencial V de la Ec. 6.2 y multiplicando toda la ecuación por $r^2\,\text{sen}^2\,\theta$, se obtiene

$$\text{sen}^2\,\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \text{sen}\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\text{sen}\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \frac{2mr^2\text{sen}^2\,\theta}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + E\right)\psi = 0 \tag{6.4}$$

Atomo de hidrógeno

Esta ecuación es la ecuación diferencial parcial de la función de onda ψ del electrón en un átomo de hidrógeno. Junto con las diversas condiciones que X debe cumplir, que se estudiaron en el capítulo 5 (por ejemplo, ψ tiene un solo valor para cada punto r,θ,ϕ), esta ecuación especifica totalmente el comportamiento del electrón. Para ver cuál es este comportamiento, resolveremos la ecuación 6.4 para ψ.

Al resolver la Ec. 6.4, resulta que se requieren tres números cuánticos para describir al electrón en un átomo de hidrógeno, en lugar del único número cuántico de la teoría de Bohr. (En el próximo capítulo veremos que se necesita un cuarto número cuántico para poder describir el spin del electrón.) En el modelo de Bohr, el movimiento del electrón es básicamente unidimensional, ya que la única cantidad que varía con el movimiento es su posición en una órbita definida. Un número cuántico es suficiente para especificar el estado del electrón, de la misma manera que un número cuántico es suficiente para especificar el estado de una partícula en una caja de una dimensión.

Para describir a una partícula en una caja tridimensional se necesitan tres números cuánticos, ya que en ese caso la función de onda ψ de la partícula debe obedecer tres conjuntos de condiciones límites: ψ debe ser 0 en las paredes de la caja, independientemente en las direcciones x,y y z. En un átomo de hidrógeno, el movimiento del electrón está restringido por el cuadrado inverso del campo eléctrico del núcleo en lugar de las paredes de una caja; no obstante, el electrón se puede mover libremente en tres dimensiones; por tanto, no debe sorprender que su función de onda este gobernada por tres números cuánticos.

Los tres números cuánticos revelados por la solución de la Ec. 6.4, junto con sus posibles valores, son los siguientes:

Número cuántico principal	$= n = 1, 2, 3, \ldots$
Número cuántico orbital	$= l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$
Número cuántico magnético	$= m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$

El número cuántico principal n gobierna la energía total del electrón, y corresponde al número cuántico n de la teoría de Bohr. El número cuántico orbital l gobierna a la magnitud del momentum angular del electrón en torno al núcleo, y el número cuántico magnético m_l gobierna a la dirección del momentum angular.

*6.2 SEPARACION DE VARIABLES

Lo verdaderamente valioso de escribir la ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas para el problema del átomo de hidrógeno está en que de esta forma se puede separar fácilmente en tres ecuaciones independientes, cada una de ellas con una sola coordenada. El procedimiento consiste en buscar las soluciones en que la función de onda $\psi(r, \theta, \phi)$ tiene la forma de un producto de tres funciones diferentes: $R(r)$, que depende solamente de r; $\Theta(\theta)$ que depende solamente de θ; y $\Phi(\phi)$ que sólo depende de ϕ. Esto es, suponemos que

6.5 $$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

Función de onda del átomo de hidrógeno

La función $R(r)$ describe la variación de la función de onda ψ del electrón a lo largo de un radio vector desde el núcleo, siendo θ y ϕ constantes. La variación de ψ con el ángulo cenital θ a lo largo de un meridiano de una esfera centrada sobre el núcleo está descrita por la función $\Theta(\theta)$ para r y ϕ constantes. Finalmente, la función $\Phi(\phi)$ describe cómo varía ψ con el ángulo azimutal ϕ a lo largo de un paralelo de una esfera centrada sobre el núcleo, siendo r y θ constantes.

La Ec. 6.5 se puede escribir más fácilmente como

$$\psi = R\Theta\Phi$$

donde vemos que

$$\frac{\partial \psi}{\partial r} = \Theta\Phi\frac{\partial R}{\partial r}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \theta} = R\Phi\frac{\partial \Theta}{\partial \theta}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} = R\Theta\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2}$$

Por tanto, cuando se sustituye $R\Theta\Phi$ por ψ en la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno y se divide la ecuación total entre $R\Theta\Phi$ se encuentra que

6.6 $$\frac{\operatorname{sen}^2\theta}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{\operatorname{sen}\theta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial \Theta}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} + \frac{2mr^2\operatorname{sen}^2\theta}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + E\right) = 0$$

El tercer término de esta ecuación sólo es función del ángulo ϕ, mientras que los otros dos son función de R y θ. Volviéndolas a escribir, tenemos

6.7 $$\frac{\operatorname{sen}^2\theta}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{\operatorname{sen}\theta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial \Theta}{\partial \theta}\right) + \frac{2mr^2\operatorname{sen}^2\theta}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + E\right) = -\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2}$$

Esta ecuación solamente puede ser correcta si sus dos miembros son iguales a la misma constante, ya que son funciones de variables *diferentes.* A esta constante es conveniente llamarla m_l^2. La ecuación diferencial para la función Φ es, por tanto,

6.8 $$-\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = m_l^2$$

Si se sustituye m_l^2 en el segundo miembro de la Ec. 6.7, se divide la ecuación resultante entre $\operatorname{sen}^2\theta$ y se reagrupan términos, se tiene

6.9 $$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + E\right) = \frac{m_l^2}{\operatorname{sen}^2\theta} - \frac{1}{\Theta\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial \Theta}{\partial \theta}\right)$$

Se tiene otra vez una ecuación en que aparecen variables diferentes en cada miembro, requiriéndose que ambas sean iguales a la misma constante. A esta constante se le llamará, por razones que veremos más adelante, $l(l+1)$. Las ecuaciones para las funciones Θ y R son, por tanto,

6.10 $$\frac{m_l^2}{\operatorname{sen}^2\theta} - \frac{1}{\Theta\operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) = l(l+1)$$

6.11 $$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + E\right) = l(l+1)$$

Las Ecs. 6.8, 6.10 y 6.11 se escriben normalmente como

6.12 $$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m_l^2\Phi = 0$$

$$6.13 \qquad \frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left[l(l+1)-\frac{m_l^2}{\operatorname{sen}^2\theta}\right]\Theta=0$$

$$6.14 \qquad \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+E\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0$$

Cada una de estas ecuaciones es una ecuación diferencial ordinaria de una función con una sola variable. Con ello se ha conseguido simplificar la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno que, al principio, era una ecuación diferencial parcial de una función ψ de tres variables.

6.3 LOS NUMEROS CUANTICOS

La Ec. 6.12 se resuelve fácilmente para encontrar

$$6.15 \qquad \Phi(\phi)=Ae^{im_l\phi}$$

donde A es la constante de integración. Una de las condiciones establecidas previamente que debe cumplir una función de onda —y por tanto Φ, que es una componente de la función completa ψ— es que tenga un único valor para cada punto del espacio. De la Fig. 6.2 se observa que ϕ y $\phi + 2\pi$ se identifican en el mismo plano meridiano. Por tanto, debe ser cierto que $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$, o bien,

$$Ae^{im_l\phi}=Ae^{im_l(\phi+2\pi)}$$

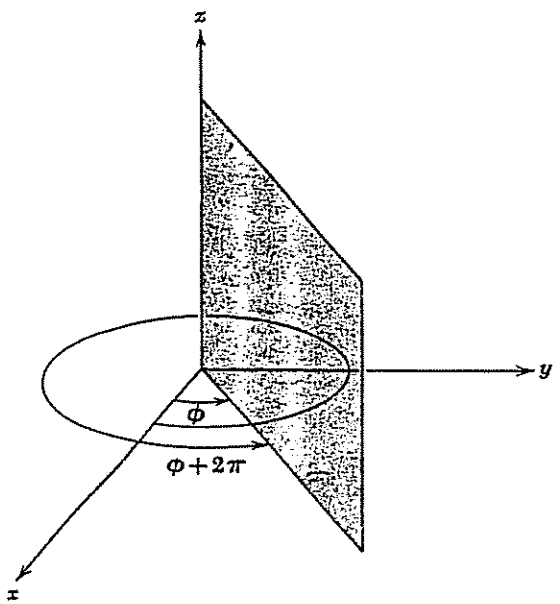


FIGURA 6-2 Los ángulos ϕ y $\phi + 2\pi$ identifican al mismo plano meridiano.

lo que solamente puede ser cuando m_l sea 0 o un número entero positivo o negativo ($\pm1, \pm2, \pm3, \ldots$). La constante m_l se conoce como el *número cuántico magnético* del átomo de hidrógeno.

La ecuación diferencial 6.13 para $\Theta(\theta)$ tiene una solución más complicada. Viene dada por las *funciones asociadas de Legendre*. Para nuestro propósito, lo más importante de estas funciones es que existen solamente cuando la constante l es un número entero igual o mayor que $|m_l|$, que es el valor absoluto de m_l. Esta exigencia se puede expresar como una condición de m_l en la forma

$$m_l = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm l$$

La constante l es el *número cuántico orbital*.

La solución de la ecuación final, Ec. 6.14, para la parte radial $R(r)$ de la función de onda ψ del átomo de hidrógeno también es complicada, y viene dada por las *funciones asociadas de Laguerre*. La Ec. 6.14 sólo se puede resolver cuando E es positivo o tiene uno de los valores negativos E_n (lo que significa que el electrón está unido al átomo), dados por

$$6.16 \qquad E_n=-\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2\hbar^2}\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

donde n es un número entero. Vemos que ésta es la misma fórmula que obtuvo Bohr para los niveles de energía del átomo de hidrógeno.

Otra condición que se debe cumplir para resolver la Ec. 6.14, es que n, conocido como *número cuántico principal*, sea igual o mayor que $l + 1$. Esto se puede expresar como una condición para l en la forma

$$l = 0, 1, 2, \ldots, (n-1)$$

Por tanto, podemos tabular los tres números cuánticos n, l y m con sus valores permisibles como sigue:

$$6.17 \qquad \begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \ldots && \text{Número cuántico orbital}\\ l &= 0, 1, 2, \ldots, (n-1) && \text{Número cuántico principal}\\ m_l &= 0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm l && \text{Número cuántico magnético}\end{aligned}$$

Es interesante observar otra vez cómo aparecen inevitablemente los números cuánticos en las teorías mecánico-cuánticas de partículas encerradas en una determinada región del espacio.

Para demostrar la dependencia de R, Θ, y Φ con los números cuánticos n, l y m_l la función de onda del electrón se puede escribir como

$$6.18 \qquad \psi = R_{nl}\Theta_{lm_l}\Phi_{m_l}$$

Las funciones de onda R, Θ, y Φ junto con ψ vienen dadas en la Tabla 6-1 para $n = 1$, 2 y 3.

www.elsolucionario.org

6.4 EL NUMERO CUANTICO PRINCIPAL

Es interesante considerar la interpretación de los números cuánticos del átomo de hidrógeno en función del modelo clásico. De acuerdo con lo que se vio en el capítulo 4, este modelo corresponde exactamente al movimiento planetario del sistema solar, excepto en que la fuerza inversamente proporcional al cuadrado de la distancia que une al electrón con el núcleo es más bien eléctrica que gravitatoria. Hay dos magnitudes que se *conservan* —esto es, mantienen un valor constante en todo tiempo— en el movimiento planetario, según demostró Newton a partir de las tres leyes empíricas de Kepler. Estas son el escalar *energía total* y el vector *momentum angular* de cada planeta.

Clásicamente, la energía total puede tener cualquier valor pero, por supuesto, debe ser negativa si el planeta está vinculado permanentemente al sistema solar. En la teoría mecánico-cuántica del átomo de hidrógeno, la energía del electrón es también una constante, pero mientras ésta puede tener cualquier valor positivo, los *únicos* negativos que le están permitidos se determinan mediante la fórmula

(6.16) $$E_n = -\frac{me^4}{32\pi\varepsilon_0{}^2\hbar^2}\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

La teoría del movimiento planetario también se puede obtener a partir de la ecuación de Schrödinger, dando una limitación para la energía, idéntica en cuanto a la forma. No obstante, el número cuántico total n para cualquiera de los planetas resulta tan grande que la separación de niveles de energía permitidos es demasiado pequeña para poder ser observada. Por este motivo, la física clásica proporciona una descripción adecuada del movimiento planetario, pero falla dentro del átomo.

La cuantización de la energía del electrón en el átomo de hidrógeno queda descrita por el número cuántico total n.

6.5 EL NUMERO CUANTICO ORBITAL

La interpretación del número cuántico orbital l es menos evidente. Examinemos la ecuación diferencial para la parte radial $R(r)$ de la función de onda ψ:

(6.14) $$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon r} + E\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0$$

Esta ecuación está relacionada únicamente con el aspecto radial del movimiento de los electrones, es decir, con el movimiento de aproximación y alejamiento de los mismos al núcleo; sin embargo, está presente en ella la energía total del electrón E. Esta energía incluye la energía cinética del electrón en su movimiento orbital que no tiene nada que ver con el movimiento radial.

n	l	m_l	$\Psi(\phi)$	$\Theta(\theta)$	$R(r)$	$\psi(r,\theta,\phi)$
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{2}{a_0{}^{3/2}}e^{-r/a_0}$	$\frac{1}{\sqrt{\pi}\,a_0{}^{3/2}}e^{-r/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}\,a_0{}^{3/2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}\,a_0{}^{3/2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}$
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{6}}{2}\cos\theta$	$\frac{1}{2\sqrt{6}\,a_0{}^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}\,a_0{}^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\cos\theta$
2	1	±1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}\operatorname{sen}\theta$	$\frac{1}{2\sqrt{6}\,a_0{}^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}\,a_0{}^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\operatorname{sen}\theta\,e^{\pm i\phi}$
3	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{2}{81\sqrt{3}\,a_0{}^{3/2}}\left(27-18\frac{r}{a_0}+2\frac{r^2}{a_0{}^2}\right)e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}\,a_0{}^{3/2}}\left(27-18\frac{r}{a_0}+2\frac{r^2}{a_0{}^2}\right)e^{-r/3a_0}$
3	1	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{6}}{2}\cos\theta$	$\frac{4}{81\sqrt{6}\,a_0{}^{3/2}}\left(6-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}e^{-r/3a_0}$	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}\,a_0{}^{3/2}}\left(6-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}e^{-r/3a_0}\cos\theta$
3	1	±1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}\operatorname{sen}\theta$	$\frac{4}{81\sqrt{6}\,a_0{}^{3/2}}\left(6-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}\,a_0{}^{3/2}}\left(6-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}e^{-r/3a_0}\operatorname{sen}\theta\,e^{\pm i\phi}$
3	2	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{10}}{4}(3\cos^2\theta-1)$	$\frac{4}{81\sqrt{30}\,a_0{}^{3/2}}\frac{r^2}{a_0{}^2}e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}\,a_0{}^{3/2}}\frac{r^2}{a_0{}^2}e^{-r/3a_0}(3\cos^2\theta-1)$
3	2	±1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm i\phi}$	$\frac{\sqrt{15}}{2}\operatorname{sen}\theta\cos\theta$	$\frac{4}{81\sqrt{30}\,a_0{}^{3/2}}\frac{r^2}{a_0{}^2}e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}\,a_0{}^{3/2}}\frac{r^2}{a_0{}^2}e^{-r/3a_0}\operatorname{sen}\theta\cos\theta\,e^{\pm i\phi}$
3	2	±2	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm 2i\phi}$	$\frac{\sqrt{15}}{4}\operatorname{sen}^2\theta$	$\frac{4}{81\sqrt{30}\,a_0{}^{3/2}}\frac{r^2}{a_0{}^2}e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{162\sqrt{\pi}\,a_0{}^{3/2}}\frac{r^2}{a_0{}^2}e^{-r/3a_0}\operatorname{sen}^2\theta\,e^{\pm 2i\phi}$

Tabla 6-1.
FUNCIONES DE ONDA NORMALIZADAS DEL ATOMO DE HIDROGENO PARA n = 1,2 Y 3. La cantidad $a_0 = \hbar^2/me^2 = 0.53$ Å es igual al radio de la órbita de Bohr más cercana al núcleo.

Esta contradicción se puede eliminar con el siguiente razonamiento: la energía cinética T del electrón tiene dos partes T_{radial}, debido a su movimiento de aproximación y alejamiento del núcleo, y T_{orbital}, debida a su movimiento alrededor de él. La energía potencial V del electrón es la energía electrostática

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

Por tanto, la energía total del electrón es

$$\begin{aligned} E &= T_{\text{radial}} + T_{\text{orbital}} + V \\ &= T_{\text{radial}} + T_{\text{orbital}} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \end{aligned}$$

Sustituyendo esta expresión de E en la Ec. 6.14 obtenemos, después de reagrupar términos,

6.19 $$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[T_{\text{radial}} + T_{\text{orbital}} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]R = 0$$

Si los dos últimos términos entre corchetes de esta ecuación se anulan entre sí, tenemos lo que necesitábamos: una ecuación diferencial para $R(r)$ constituida exclusivamente por funciones del radio vector. Por tanto, necesitamos que

6.20 $$T_{\text{orbital}} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

La energía cinética orbital del electrón es

$$T_{\text{orbital}} = \tfrac{1}{2} m v^2_{\text{orbital}}$$

Puesto que el momentum angular L del electrón es

$$L = m v_{\text{orbital}} r$$

podemos expresar la energía cinética orbital

$$T_{\text{orbital}} = \frac{L^2}{2mr^2}$$

Por tanto, en la Ec. 6.20 tenemos

$$\frac{L^2}{2mr^2} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

o

Momentum angular del electrón

6.21 $$L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$$

La interpretación de este resultado es que, puesto que el número cuántico orbital l está limitado a los valores

$$l = 0, 1, 2, \ldots, (n-1)$$

el electrón puede tener solamente los momenta angulares L que se especifican mediante la Ec. 6.21. Al igual que la energía total E, *el momentum angular se conserva y está cuantizado*. El término

$$\hbar = h/2\pi = 1.054 \times 10^{-34}\ \text{J-s}$$

es la unidad natural de momentum angular.

En el movimiento planetario macroscópico, una vez más, el número cuántico que describe el momentum angular es tan grande que la separación en estados discretos del momentum angular no se puede observar experimentalmente. Por ejemplo, un electrón (o para este caso, cualquier otro cuerpo) cuyo número cuántico orbital sea 2, tiene un momentum angular

$$\begin{aligned} L &= \sqrt{2(2+1)}\,\hbar \\ &= \sqrt{6}\,\hbar \\ &= 2.6 \times 10^{-34}\ \text{J-s} \end{aligned}$$

Por el contrario, el momentum angular orbital de la Tierra es 2.7×10^{40} J-s!

Se acostumbra designar a los estados de momentum angular con la letra s para $l = 0$, con la letra p cuando $l = 1$, y así sucesivamente, de acuerdo con el siguiente esquema

$l = 0$	1	2	3	4	5	6 ...
s	p	d	f	g	h	i ...

Estados del momentum angular

Este original código se originó en la clasificación empírica de los espectros en las llamadas series que recibieron los nombres de definida, principal, difusa y fundamental, nombres que se les dio desde antes de que se desarrollara la teoría del átomo. Así, un estado s es el que no tiene momentum angular, un estado p tiene el momentum angular $\sqrt{2}\,\hbar$, etc.

La combinación del número cuántico total con la letra que representa al momentum angular orbital proporciona una notación apropiada, y que es muy común para los estados atómicos. En esta notación, un estado en el que $n = 2$, $l = 0$ es un estado $2s$, por ejemplo, y uno en el que $n = 4$, $l = 2$ es un estado $4d$. En la tabla 6.2 se indican las designaciones de los estados atómicos en el hidrógeno hasta $n = 6$, $l = 5$.

Tabla 6.2

Representación simbólica de los estados atómicos en el hidrógeno.

	s $l=0$	p $l=1$	d $l=2$	f $l=3$	g $l=4$	h $l=5$
$n=1$	$1s$					
$n=2$	$2s$	$2p$				
$n=3$	$3s$	$3p$	$3d$			
$n=4$	$4s$	$4p$	$4d$	$4f$		
$n=5$	$5s$	$5p$	$5d$	$5f$	$5g$	
$n=6$	$6s$	$6p$	$6d$	$6f$	$6g$	$6h$

6.6 EL NUMERO CUANTICO MAGNETICO

El número cuántico orbital l determina la *magnitud* del momentum angular del electrón. Al igual que el momentum linear, el momentum angular es un vector, de modo que para describirlo se requiere que se especifique su *dirección*, su sentido y su magnitud. (El vector **L**, podemos recordarlo, es perpendicular al plano en el que tiene lugar el movimiento de rotación, y su dirección y sentido están dados por la regla de la mano derecha: cuando los dedos apuntan en la dirección del movimiento, el pulgar tiene la dirección y el sentido de **L**. Esta regla se ilustra en la Fig. 6.3.)

¿Qué significado posible pueden tener una dirección y un sentido en el espacio para un átomo de hidrógeno? La respuesta es sencilla si pensamos que un electrón que gira alrededor de un núcleo es un diminuto circuito que, como dipolo magnético, tiene también un campo magnético. En consecuencia, un electrón atómico que posee momentum angular interactúa con un campo magnético externo **B**. El número cuántico magnético m_l especifica la dirección de **L**, determinando la componente de **L** en la dirección del campo. Este fenómeno se conoce comúnmente con el nombre de *cuantización espacial*.

Si hacemos que la dirección del campo magnético sea paralela al eje z, la componente de **L** en esta dirección es

6.22 $$L_z = m_l\hbar$$ Cuantización espacial

Los posibles valores de m_l para un valor dado de l, van desde $+l$ hasta $-l$, pasando por 0, de modo que las posibles orientaciones del vector momentum angular **L** en un campo magnético son $2l + 1$. Cuando $l = 0$, L_z puede tener solamente el valor cero, cuando $l = 1$, L_z puede ser $\hbar$, 0, ó $-\hbar$; cuando $l = 2$, L_z puede ser $2\hbar$, $\hbar$, 0, $-\hbar$, ó $-2\hbar$, y así sucesivamente. Aclaremos que **L** nunca

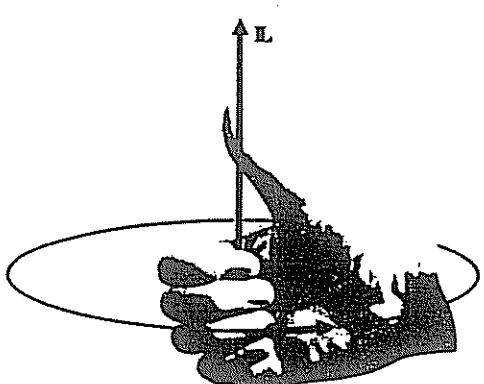


FIGURA 6-3 Regla de la mano derecha para el momentum angular.

puede estar alineado exactamente (paralela o antiparalelamente) con **B**, ya que L_z es siempre más pequeño que la magnitud $\sqrt{l(l+1)}\,\hbar$ del momentum angular total.

La cuantización espacial del momentum angular orbital del átomo de hidrógeno se muestra en la Fig. 6-4. Debemos considerar al átomo caracterizado por un cierto valor de m_l como preparado para tomar una determinada orientación de su momentum angular **L**, relativo a un campo magnético externo en el caso de encontrarse en él.

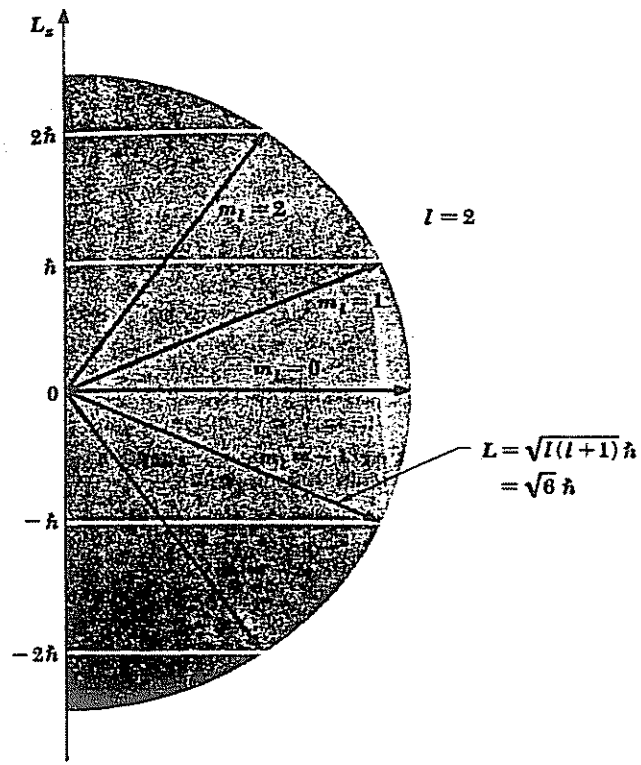


FIGURA 6-4 Cuantización del espacio del momentum angular orbital.

En ausencia de un campo magnético externo, la dirección del eje z es completamente arbitraria. Por tanto, debe ser cierto que la componente de **L** en cualquier dirección que escojamos es $m_l\hbar$; el significado de un campo magnético externo es que proporciona una dirección de referencia importante experimentalmente. Un campo magnético no es la única dirección de

www.elsolucionario.org

referencia posible. Por ejemplo, la línea entre los dos átomos H en la molécula de hidrógeno H_2 tiene tanto significado experimental como la dirección de un campo magnético y, a lo largo de esta línea, las componentes de los momenta angulares de los átomos H están determinadas por sus valores m_l.

¿Por qué está cuantizada únicamente la componente de **L**? La respuesta se relaciona estrechamente con el hecho de que **L** nunca puede apuntar a

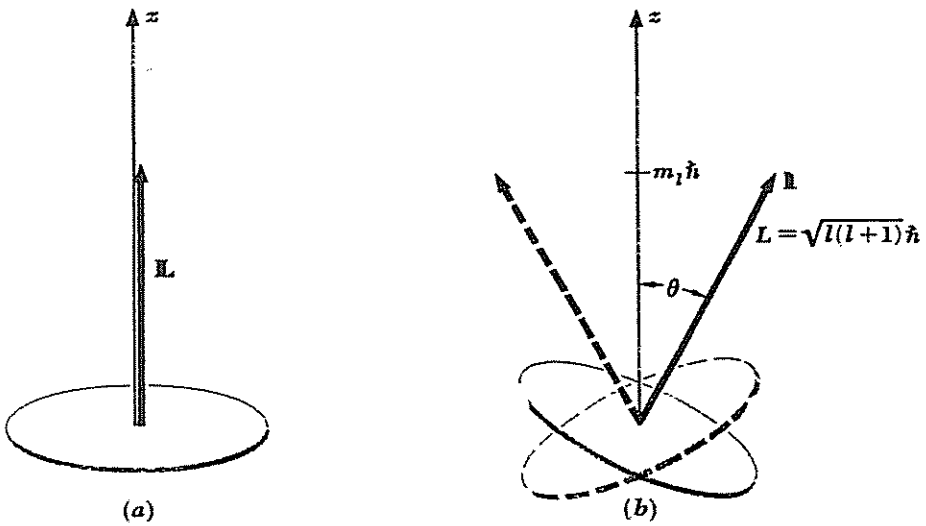


FIGURA 6-5 El principio de incertidumbre prohibe que el vector L de momentum angular tenga una dirección definida en el espacio.

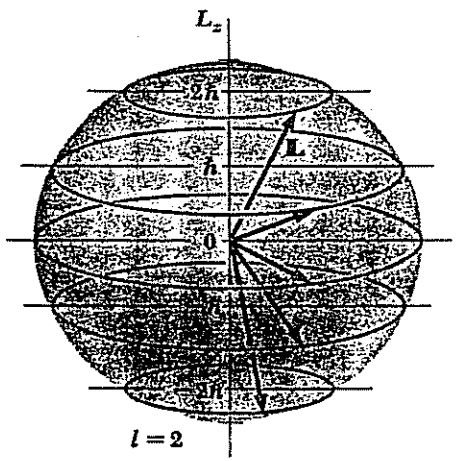


FIGURA 6-6 El vector L de momentum angular tiene precesión constante en torno al eje z.

cualquier dirección z específica; en lugar de ello describe un cono en el espacio, de manera que su proyección L_z es $m_l\hbar$. La razón de este fenómeno es el principio de incertidumbre: si **L** estuviera fijo en el espacio, de manera que L_x, L_y y L_z tuvieran valores definidos, el electrón estaría confinado en un plano definido. Por ejemplo, si **L** estuviera en la dirección z, el electrón tendría que estar en el plano xy todo el tiempo (Fig. 6-5*a*). Esto únicamente puede ocurrir si la componente del momentum del electrón p_z en la dirección z es infinitamente incierta, lo que, por supuesto, es imposible si es parte de un átomo de hidrógeno. Sin embargo, como en realidad únicamente *una* componente L_z de **L** junto con su magnitud L tiene valores definidos y $|L| > |L_z|$, el electrón no está limitado a un plano único (Fig. 6-5*b*), y si así fuera, habría una fundada incertidumbre en la coordenada z del electrón. La dirección de **L** cambia constantemente (Fig. 6-6) y así los valores promedio de L_x y L_y son 0, aunque L_z tenga siempre el valor específico $m_l\hbar$.

6.7 EFECTO ZEEMAN NORMAL

En un campo magnético externo **B**, un dipolo magnético tiene una cantidad de energía potencial V_m que depende de la magnitud μ de su momento magnético y de la orientación de este momento con respecto al campo (Fig. 6-7).

La torca τ sobre un dipolo magnético en un campo magnético de densidad

$$\tau = \mu B \operatorname{sen}\theta$$

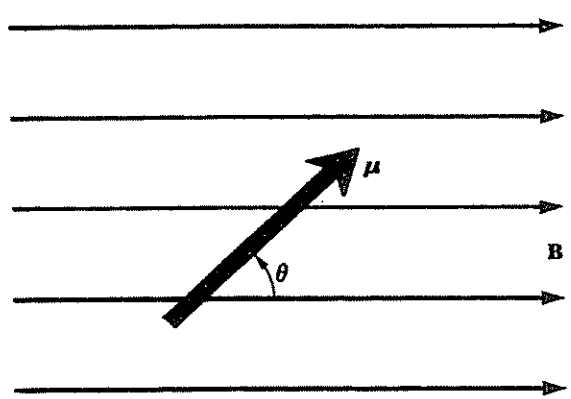


FIGURA 6-7 Dipolo magnético de momento μ con ángulo θ relativo a un campo magnético B.

de flujo **B** está donde θ es el ángulo entre μ y **B**. La torca es máxima cuando el dipolo es perpendicular al campo, y cero cuando es paralelo o antiparalelo a él. Para calcular la energía potencial V_m debemos establecer primero una con-

figuración de referencia para la que V_m sea cero por definición. (Puesto que experimentalmente sólo se observan *variaciones* de energía potencial, la elección de la configuración de referencia es arbitraria.) Es conveniente establecer que $V_m = 0$ cuando $\theta = 90°$, o sea, cuando μ es perpendicular a **B**. La energía potencial para cualquier otra orientación de μ es igual al trabajo externo que se debe hacer para girar el dipolo desde $\theta_0 = 90°$ hasta el ángulo θ característico de esa orientación. Por tanto,

$$\begin{aligned} V_m &= \int_{90°}^{\theta} \tau \, d\theta \\ &= \mu B \int_{90°}^{\theta} \operatorname{sen} \theta \, d\theta \\ &= -\mu B \cos \theta \end{aligned} \tag{6.23}$$

Cuando μ se orienta en la misma dirección que **B**, entonces $V_m = -\mu B$ tiene su valor mínimo. Esto es una consecuencia natural del hecho de que un dipolo tiende a alinearse de acuerdo con un campo magnético externo.

Puesto que el momento magnético del electrón orbital en el átomo de hidrógeno depende del momentum angular **L**, la magnitud de éste y su orientación con respecto al campo determinan la cuantía de la contribución magnética a la energía total del átomo cuando está en un campo magnético. El momento magnético de una espira de corriente es

$$\mu = iA$$

donde i es la corriente y A el área encerrada. Un electrón que da ν revol/s en una órbita circular de radio r, equivale a una corriente de $-e\nu$ (ya que la carga del electrón es $-e$), y su momento magnético es, por tanto,

$$\mu = -e\nu\pi r^2$$

La velocidad lineal v del electrón es $2\pi\nu r$, y su momentum angular

$$\begin{aligned} L &= mvr \\ &= 2\pi m\nu r^2 \end{aligned}$$

Comparando las fórmulas del momento magnético μ y del momentum angular L se tiene, para un electrón orbital,

$$\mu = -\left(\frac{e}{2m}\right)\mathbf{L} \tag{6.24}$$

Momento magnético del electrón

El cuántico $-e/2m$, que relaciona la carga y la masa del electrón únicamente, recibe el nombre de *razón giromagnética*. El signo menos significa que μ tiene sentido opuesto a **L**. Aunque esta expresión se ha determinado por cálculos clásicos, en la mecánica cuántica se encuentran los mismos resultados. La energía potencial magnética de un átomo en un campo magnético es

$$V_m = \left(\frac{e}{2m}\right) LB \cos \theta \tag{6.25}$$

que es función de B y θ.

En la Fig. 6-5 se ve que el ángulo θ entre **L** y la dirección z puede tener solamente el valor dado por la relación

$$\cos \theta = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}$$

mientras que los valores permitidos de L están dados por

$$L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$$

Para hallar la energía magnética que tiene un átomo de número cuántico magnético m_l cuando está en un campo magnético **B**, se sustituyen los anteriores valores de θ y L en la Ec. 6.25, y se obtiene

$$V_m = m_l\left(\frac{e\hbar}{2m}\right)B \tag{6.26}$$

Energía magnética

El término $e\hbar/2m$ recibe el nombre de *magnetón Bohr*; su valor es de 9.27×10^{-24} J/T. (T es la abreviatura de tesla.)

De este modo, en un campo magnético, la energía de un estado atómico particular depende del valor de m_l y del de n. Un estado de número cuántico total n se disgrega en varios subestados cuando el átomo se encuentra en un campo magnético, y sus energías son ligeramente mayores o menores que la energía de dicho estado en ausencia del campo. Este fenómeno conduce a un desdoblamiento de las líneas espectrales individuales en líneas separadas al radiar los átomos en un campo magnético. El espaciado de las líneas depende de la magnitud del campo. El desdoblamiento de las líneas espectrales por un campo magnético recibe el nombre de *efecto Zeeman*, debido a que fue el físico alemán Zeeman el primero que lo observó en 1896. El efecto Zeeman es una confirmación patente de la cuantización espacial; se estudiará en el Cap. 7.

6.8 LA DENSIDAD DE PROBABILIDAD ELECTRONICA

En el modelo de Bohr del átomo de hidrógeno, el electrón gira alrededor del

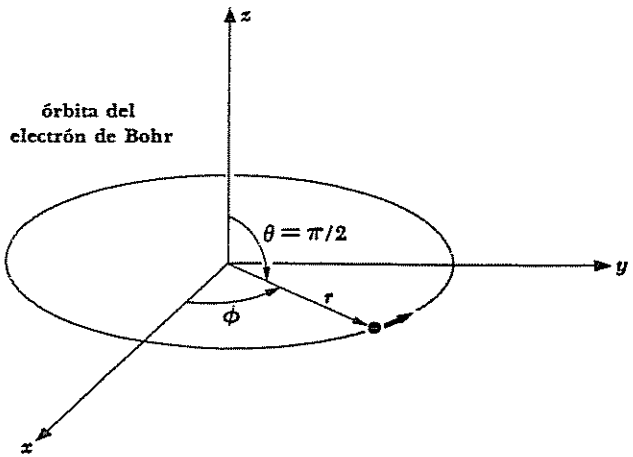


FIGURA 6-8 Modelo de Bohr del átomo de hidrógeno en un sistema de coordenadas polares esféricas.

núcleo con una trayectoria circular. Este modelo se representa en la Fig. 6-8 en un sistema de coordenadas polares esféricas. Si se realizara un experimento adecuado, se vería que el electrón estaría siempre a una distancia del núcleo $r = n^2 a_0$ (donde n es el número cuántico de la órbita y $a_0 = 0.53$ Å es el radio de la órbita más próxima al núcleo) y en el plano ecuatorial $\theta = 90°$, mientras que el ángulo azimutal ϕ varía con el tiempo.

La teoría cuántica del átomo de hidrógeno modifica las conclusiones del modelo de Bohr en dos aspectos. En primer lugar, no se pueden dar valores correctos de r, θ o ϕ, sino únicamente probabilidades relativas de encontrar al electrón en un lugar dado. Esta imprecisión es, por supuesto, una consecuencia de la naturaleza ondulatoria del electrón. En segundo lugar, no se puede pensar que el electrón se mueve alrededor del núcleo en un sentido convencional, ya que la densidad de probabilidad $|\psi|^2$ es independiente del tiempo y puede variar considerablemente de un lugar a otro.

La función de onda del electrón ψ en un átomo de hidrógeno viene dada por

$$\psi = R\Theta\Phi$$

donde

$$R = R_{nl}(r)$$

describe cómo varía ψ con r cuando los números cuánticos orbital y total tienen los valores n y l;

$$\Theta = \Theta_{lm_l}(\theta)$$

describe a su vez la variación de ψ con θ cuando los números cuánticos magnético y orbital tienen los valores l y m_l; y

$$\Phi = \Phi_{m_l}(\phi)$$

que proporciona la variación de ψ con ϕ cuando el número cuántico magnético es m_l. Entonces, la densidad de probabilidad $|\psi|^2$ se puede escribir como

$$|\psi|^2 = |R|^2|\Theta|^2|\Phi|^2 \tag{6.27}$$

donde se comprende que si la función es compleja, hay que tener en cuenta que su cuadrado se debe sustituir por el producto de ella y su conjugada compleja.

La densidad de probabilidad $|\Phi|^2$, que mide la posibilidad de encontrar al electrón con un ángulo azimutal ϕ dado, es una constante que no depende para nada de ϕ. Por tanto, la densidad de probabilidad del electrón es simétrica respecto al eje de las z, independientemente del estado cuántico, de manera que el electrón tiene igual oportunidad de encontrarse en un ángulo ϕ como en otro.

La parte radial R de la función de onda, en contraste con Φ, no solamente varía con r, sino que lo hace de una manera diferente para cada combinación de números cuánticos n y l. La Fig. 6-9 muestra gráficas de R en función de r para los estados $1s$, $2s$, $3s$, $3p$ y $3d$ del átomo de hidrógeno. Evidentemente, R es máximo al ser $r = 0$ —esto es, en el núcleo mismo— para todos los estados s, mientras que es cero en $r = 0$ para todos los estados que poseen momentum angular.

La *densidad de probabilidad* del electrón en el punto r, θ, ϕ es proporcional a $|\psi|^2$, pero la *probabilidad real* de encontrarlo en el elemento de volumen infinitesimal dV es $|\psi|^2\, dV$. Ahora, en coordenadas polares esféricas

$$dV = r^2 \operatorname{sen}\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

de manera que, como Θ y Φ son funciones normalizadas, la probabilidad numérica real $P(r)dr$ de encontrar al electrón en el átomo de hidrógeno, a una distancia comprendida entre r y $r + dr$ del núcleo, es

$$\begin{aligned} P(r)dr &= r^2|R|^2 dr \int_0^{\pi} |\Theta|^2 \operatorname{sen}\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} |\Phi|^2 d\phi \\ &= r^2 |R|^2\, dr \end{aligned} \tag{6.28}$$

Esta ecuación está representada en la Fig. 6-10 para los mismos estados cuyas funciones radiales R aparecen en la Fig. 6-9; en principio, las curvas son completamente diferentes. Observamos de inmediato que P no es máximo

www.elsolucionario.org

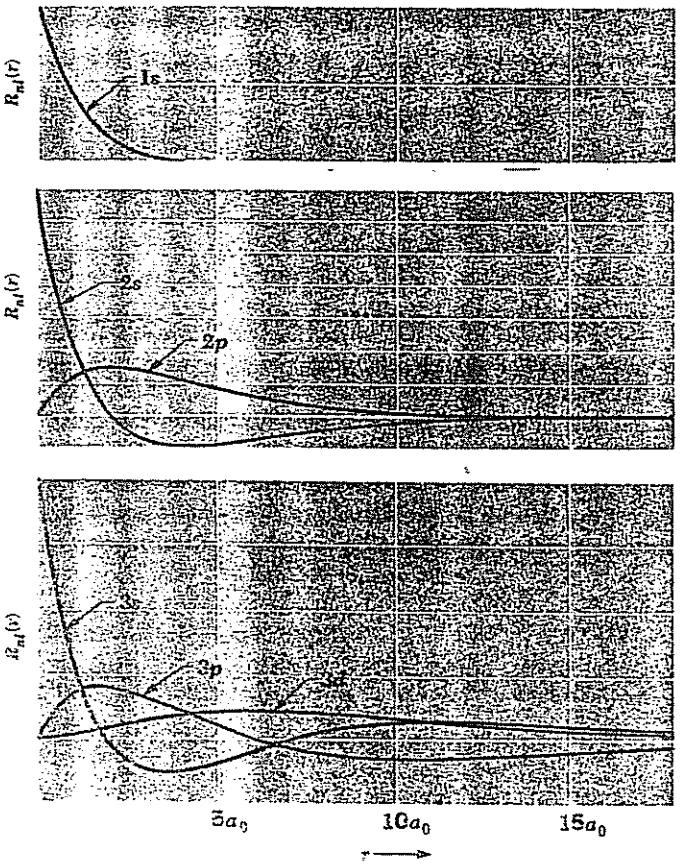


FIGURA 6-9 Variación con la distancia al núcleo de la parte radial de la función de onda del electrón en el hidrógeno para varios estados cuánticos. La cantidad $a_0 = \hbar^2/me^2 = 0.53$ Å es el radio de la primera órbita de Bohr.

en el núcleo para los estados s, como lo es R, sino que tiene su máximo a una distancia finita de él. El valor más probable de r para un electrón $1s$ es exactamente a_0, que es el radio de la órbita del electrón en estado fundamental en el modelo de Bohr. Sin embargo, el valor *medio* de r para un electrón $1s$ es $1.5a_0$, lo cual parece enigmático a primera vista, ya que los niveles de energía son los mismos en mecánica cuántica y en el modelo atómico de Bohr. Esta aparente discrepancia se elimina cuando se tiene en cuenta que la energía del electrón depende de $1/r$ y no directamente de r, y el valor medio de $1/r$ para un electrón $1s$ es precisamente $1/a_0$.

La función Θ varía con el ángulo cenital θ para todos los números cuánticos l y m_l, excepto para $l = m_l = 0$, que son estados s. La densidad de probabilidad $|\Theta|^2$ para un estado s, es una constante (1/2), lo que significa que, como $|\Phi|^2$ es también constante, la densidad de probabilidad electrónica

$|\psi|^2$ tiene el mismo valor, para un valor de r dado, en todas las direcciones. Los electrones en otros estados tienen preferencias angulares que algunas veces llegan a ser muy complicadas. Esto se puede observar en la Fig. 6-11, donde se muestran, para varios estados atómicos, las densidades de probabilidad electrónica en función de r y θ. (El término que se representa es $|\psi|^2$, y no $|\psi|^2 dV$.) Puesto que $|\psi|^2$ es independiente de ϕ, una representación tridimensional de $|\psi|^2$ se obtiene haciendo girar una representación particular alrededor de un eje vertical. Al hacerlo, las densidades de probabilidad para los estados s tienen evidentemente simetría esférica, mientras que las otras no la tienen. Los tipos de lóbulos pronunciados, característicos de muchos de los estados, tienen importancia en química ya que estos modelos ayudan a determinar la manera como interactúan en las moléculas los átomos adyacentes; en el Cap. 8 nos referiremos a ello con más detalle.

Un estudio de la Fig. 6-11 revela también un marcado parecido de los estados cuánticos con los del modelo de Bohr. La distribución de densidad de probabilidad electrónica para un estado $2p$ con $m_l = \pm 1$, es una especie de "dona" en el plano ecuatorial, centrada en el núcleo, y los cálculos demuestran que la distancia más probable del electrón al núcleo es $4r_0$ —precisamente el radio de la órbita de Bohr para el mismo número cuántico total. Existen correspondencias similares para el estado $3d$ con $m_l = \pm 2$, para el $4f$ con $m_l = \pm 3$, y así sucesivamente; en cada caso, el más elevado momentum angular posible para aquel nivel de energía, y el vector momentum angular tan próximo como se pueda al eje z, de modo que la densidad de probabilidad se aproxime lo más posible al plano ecuatorial. De este modo, el modelo de Bohr predice la localización más probable del electrón en *uno* de los estados posibles en cada nivel de energía.

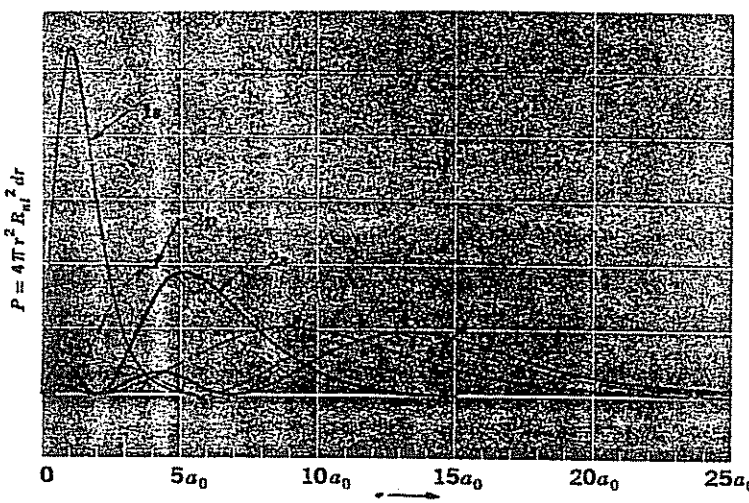


FIGURA 6-10 Probabilidad de encontrar un electrón del átomo de hidrógeno a una distancia del núcleo entre r y $r + dr$ para los estados cuánticos de la Fig. 6-9.

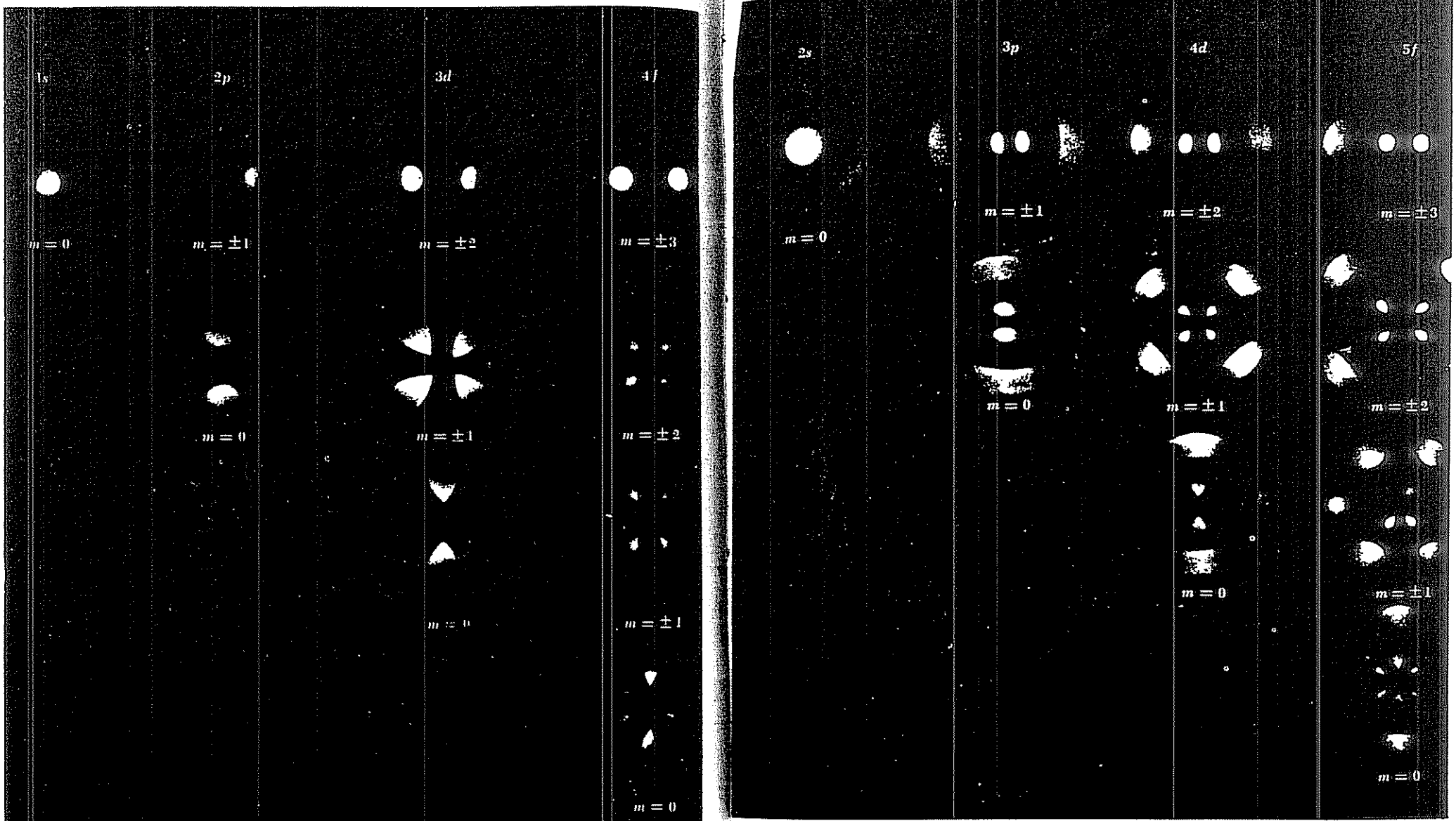


FIGURA 6-11 Representación fotográfica de la distribución de la densidad de probabilidad electrónica $|\psi|^2$ para varios estados de energía. Se puede considerar como un corte transversal de las distribuciones por un plano que contiene al eje polar, que es vertical y se encuentra en el plano del papel. La escala varía de figura a figura.

6.9 TRANSICIONES RADIATIVAS

Al formular la teoría del átomo de hidrógeno, Bohr se vio obligado a afirmar que la frecuencia ν de la radiación emitida por un átomo que pasa de un nivel de energía E_m a otro inferior E_n es

$$\nu = \frac{E_m - E_n}{h}$$

No es difícil demostrar que esta relación surge de la teoría cuántica del átomo que hemos estado estudiando. Nuestro punto de partida es la afirmación de que un electrón atómico, cuya posición media relativa al núcleo es constante en el tiempo, no radia, mientras que si esta posición oscila se emiten ondas electromagnéticas cuya frecuencia es la misma que la de la oscilación. Para simplificar, consideraremos que el electrón tiene limitado su movimiento únicamente a la dirección del eje x.

La función de onda dependiente del tiempo de un electrón en un estado de número cuántico n y energía E_n, es el producto de una función de onda ψ_n que no depende del tiempo, y de otra función que varía con él y cuya frecuencia es

$$\nu_n = \frac{E_n}{h}$$

Por tanto,

6.29 $$\Psi_n = \psi_n e^{-(iE_n/\hbar)t}$$

y

6.30 $$\Psi_n^* = \psi_n^* e^{+(iE_n/\hbar)t}$$

La posición media del electrón es el valor esperado de x (Sec. 5.4), es decir

6.31 $$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \Psi_n^* \Psi_n \, dx$$

Introduciendo las funciones de onda de las Ecs. 6.29 y 6.30

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \psi_n^* \psi_n e^{[(iE_n/\hbar)-(iE_n/\hbar)]t} \, dx$$

6.32 $$= \int_{-\infty}^{\infty} x \psi_n^* \psi_n \, dx$$

que es constante en tiempo, ya que ψ_n y ψ_n^* son, por definición, únicamente funciones de la posición. El electrón no oscila y no hay radiación. De este modo, la mecánica cuántica predice que un átomo en un estado cuántico específico no radia; esto concuerda con la experiencia, aunque no con la física clásica.

En este momento estamos en condiciones de considerar el caso del electrón que cambia de un estado de energía a otro. Formulemos un problema concreto:

un átomo está en su estado fundamental cuando en $t = 0$, un determinado proceso de excitación (un haz de radiación o choques con otras partículas) empieza a actuar sobre él. Posteriormente, encontramos que el átomo emite la radiación correspondiente a una transición desde un estado excitado de energía E_m al estado fundamental, concluyéndose que durante algún tiempo del periodo el átomo existió en el estado m. ¿Cuál es la frecuencia de la radiación?

La función de onda Ψ de un electrón capaz de existir en estados n o m se puede escribir como

6.33 $$\Psi = a\Psi_n + b\Psi_m$$

donde a^*a es la probabilidad de que el electrón esté en el estado n, y b^*b la de que esté en el estado m. Por supuesto, se debe cumplir siempre que $a^*a + b^*b = 1$. Para $t = 0$, $a = 1$ y $b = 0$ por hipótesis; cuando el electrón está en el estado excitado $a = 0$ y $b = 1$; y finalmente $a = 1$ y $b = 0$ otra vez. Mientras el electrón está en un estado o en otro no hay radiación, pero cuando está en la mitad de la transición de m a n (es decir, cuando a y b tienen valores no nulos) se producen ondas electromagnéticas. Sustituyendo la función de onda compuesta de la Ec. 6.33 en la 6.31, se obtiene, para la posición media del electrón

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x(a^*\Psi_n^* + b^*\Psi_m^*)(a\Psi_n + b\Psi_m) \, dx$$

6.34 $$= \int_{-\infty}^{\infty} x(a^2\Psi_n^*\Psi_n + b^*a\Psi_m\Psi_n + a^*b\Psi_n^*\Psi_m + b^2\Psi_m^*\Psi_m) \, dx$$

(Aquí, anteriormente se obtuvo $a^*a = a^2$ y $b^*b = b^2$.) Las integrales primera y última son constantes, de acuerdo con la Ec. 6.32, y las integrales segunda y tercera son las únicas capaces de contribuir a una variación en el tiempo en $\langle x \rangle$.

Con la ayuda de las Ecs. 6.29 a 6.31 podemos desarrollar la Ec. 6.34 para obtener

6.35 $$\langle x \rangle = a^2 \int_{-\infty}^{\infty} x\psi_n^*\psi_n \, dx + b^*a \int_{-\infty}^{\infty} x\psi_m^* e^{+(iE_m/\hbar)t} \psi_n e^{-(iE_n/\hbar)t} \, dx$$
$$+ a^*b \int_{-\infty}^{\infty} x\psi_n^* e^{+(iE_n/\hbar)t} \psi_m e^{-(iE_m/\hbar)t} dx + b^2 \int_{-\infty}^{\infty} x\psi_m^*\psi_m \, dx$$

En el caso de un sistema de dos estados con límites finitos, que es lo que tenemos aquí,

$$\psi_n^*\psi_m = \psi_m^*\psi_n \qquad \text{y} \qquad a^*b = b^*a$$

lo que nos permite reunir los términos dependientes del tiempo de la Ec. 6.35 en uno solo

www.elsolucionario.org

6.36 $$a^*b\int_{-\infty}^{\infty} x\psi_n^*\psi_m[e^{(i/\hbar)(E_m-E_n)t}+e^{-(i/\hbar)(E_m/E_n)t}]\,dx$$

Ahora

$$e^{i\theta}+e^{-i\theta}=2\cos\theta$$

Por tanto, la Ec. 6.36 se simplifica así

$$2a^*b\cos\left(\frac{E_m-E_n}{\hbar}\right)t\int_{-\infty}^{\infty} x\psi_n^*\psi_m\,dx$$

que contiene el factor variable en el tiempo

$$\cos\left(\frac{E_m-E_n}{\hbar}\right)t=\cos 2\pi\left(\frac{E_m-E_n}{h}\right)t$$
$$=\cos 2\pi\nu t$$

La posición del electrón oscila pues, sinusoidalmente a la frecuencia

6.37 $$\nu=\frac{E_m-E_n}{h}$$

La expresión total para $\langle x\rangle$, posición media del electrón, es

6.38 $$\langle x\rangle=a^2\int_{-\infty}^{\infty} x\psi_n^*\psi_n\,dx+b^2\int_{-\infty}^{\infty} x\psi_m^*\psi_m\,dx$$
$$+2a^*b\cos 2\pi\nu t\int_{-\infty}^{\infty} x\psi_n^*\psi_m\,dx$$

Cuando el electrón está en estado n o en estado m, las probabilidades b^2 o a^2 son cero, respectivamente, y el valor esperado para la posición del electrón es constante. Cuando el electrón está sufriendo una transición entre estos estados, su posición media oscila con una frecuencia ν. Esta frecuencia es idéntica a la que postuló Bohr y se comprobó experimentalmente y, según hemos visto, la Ec. 6.37 se puede obtener utilizando la mecánica cuántica sin hacer ninguna suposición especial.

Es interesante observar que la frecuencia de la radiación es la misma que la de las pulsaciones, que podemos imaginar se producen si el electrón existe simultáneamente en ambos estados, n y m, y cuyas frecuencias características son respectivamente E_n/h y E_m/h.

6.10 LAS REGLAS DE SELECCION

Para determinar V, no ha sido necesario conocer las probabilidades a y b en función del tiempo, o las funciones de onda del electrón, ψ_n y ψ_m. No obstante, se deben conocer estas cantidades si queremos calcular la probabilidad de que

ocurra una transición dada. La condición general necesaria para que un átomo en un estado excitado radie es que la integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\psi_n\psi_m^*\,dx$$

no sea cero, ya que la intensidad de la radiación es proporcional a ella. Las transiciones para las que esta integral es finita se conocen por *transiciones permitidas*, mientras que para las que es cero se llaman *transiciones prohibidas*.

En el caso del átomo de hidrógeno son necesarios tres números cuánticos para especificar el estado inicial y el final relacionados con una transición radiativa. Si los números cuánticos total, orbital y magnético del estado inicial son n', l', m_l' respectivamente, y los del estado final n, l, m_l, y la coordenada u representa a la coordenada x, y y z, la condición para una transición permitida es

6.39 $$\int_{-\infty}^{\infty} u\psi_{n,l,m_l}\psi_{n',l',m_l'}^*\,du\neq 0$$

Cuando u, por ejemplo, se toma como x, la radiación a que se refiere es la que produciría una antena dipolar colocada a lo largo del eje x. Ya que se conocen las funciones de onda ψ_{n,l,m_l} para el átomo de hidrógeno, se puede calcular la ecuación 6.39 para $u=x$, $u=y$ y $u=z$, para todas las parejas de estados que difieran en uno o más números cuánticos. Cuando esto se hace, se encuentra que las únicas transiciones que pueden ocurrir son en las que el número cuántico orbital l varía en $+1$ ó -1, y el número cuántico magnético m_l no varía o varía también en $+1$ ó -1; en otras palabras, la condición para una transición permitida es que

6.40 $$\Delta l=\pm 1$$

6.41 $$\Delta m_l=0,\ \pm 1$$

Reglas de selección

La variación del número cuántico total n no está restringida. Las Ecs. 6.40 y 6.41 se conocen como las *reglas de selección* de transiciones permitidas.

Para obtener una idea intuitiva de las bases físicas de estas reglas de selección, refirámonos de nuevo a la Fig. 6-11. Allí vemos que una transición, por ejemplo, del estado $2p$ al $1s$ implica un cambio de una distribución de densidad de probabilidad a otra, de manera que la carga oscilante durante las transiciones se comporta como una antena dipolar eléctrica. Por otro lado, una transición de un estado $2s$ a otro $1s$ supone un cambio de una simetría esférica en la distribución de densidad de probabilidad a otra, lo que quiere decir que las oscilaciones que tienen lugar son como las de una esfera cargada, que alternativamente se expande y se contrae. Las oscilaciones de este tipo conducen a la radiación de ondas electromagnéticas.

La regla de selección, al exigir que l cambie en ± 1 si el átomo radia, quiere decir que un fotón emitido transporta un momentum angular igual a la diferencia entre el momentum angular del átomo del estado inicial y final. La analogía clásica de un fotón con momentum angular es una onda electromagnética polarizada circularmente, de modo que esta noción no es exclusiva de la teoría cuántica.

El análisis anterior sobre transiciones radiativas en un átomo se basa en una mezcla de conceptos clásicos y cuánticos. Como hemos visto, el valor esperado de la posición de un electrón atómico oscila con la frecuencia ν de la Ec. 6.37 cuando pasa de un eigenestado inicial a otro de menor energía. Bajo el punto de vista clásico, esta carga oscilante da lugar a ondas electromagnéticas de la misma frecuencia ν y, por tanto, la radiación observada tiene la misma frecuencia. Sin embargo, los conceptos clásicos no son siempre guías fidedignas de los procesos atómicos, y se requiere un estudio más profundo. Este estudio, denominado *electrodinámica cuántica,* modifica la imagen precedente mostrando que un fotón único de energía $h\nu$ es emitido durante la transición del estado m al estado n en lugar de una radiación dipolar eléctrica en todas las direcciones, excepto en la de movimiento del electrón, lo cual sería una predicción clásica.

Además, la electrodinámica cuántica proporciona una explicación para el mecanismo que causa la transición "espontánea" de un átomo de un estado de energía a otro inferior. Todos los campos eléctricos y magnéticos resultan fluctuar constantemente entre $\mathbf{E}$ y $\mathbf{B}$ de acuerdo con lo esperado en campos puramente clásicos. Tales fluctuaciones ocurren aun cuando no haya ondas electromagnéticas y cuando, de manera clásica, $\mathbf{E} = \mathbf{B} = 0$. Son estas fluctuaciones (comúnmente llamadas "fluctuaciones al vacío" y análogas en cierto sentido a las vibraciones de punto cero de un oscilador armónico) las que inducen a los átomos en estados excitados a emitir fotones "espontáneos".

Problemas

1. Demostrar que las Ecs. 6.1 y 6.3 son equivalentes.

*2. Demostrar que

$$\Theta_{20}(\theta) = \frac{\sqrt{10}}{4}(3\cos^2\theta - 1)$$

es una solución de la Ec. 6.13, y que está normalizada.

*3. Demostrar que

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$$

es una solución de la Ec. 6.14 y que está normalizada.

4. En la sección 6.8 se establece que la probabilidad P de encontrar al electrón en un átomo de hidrógeno entre r y $r + dr$ a partir del núcleo es $P\,dr = r^2|R_{nl}|^2\,dr$. Comprobar que $P dr$ tiene su valor máximo para un electrón $1s$ en $r = a_0$, el radio de Bohr.

5. De acuerdo con la Fig. 6-10, $P\,dr$ tiene *dos* máximos para un electrón $2s$. Hallar los valores de r en los cuales ocurren estos máximos.

6. La función de onda para un átomo de hidrógeno en un estado $2p$ varía con la dirección, así como con la distancia al núcleo. En el caso de un electrón $2p$ para el que $m_l = 0$, ¿dónde tiene P su máximo en la dirección z?, ¿en el plano xy?

7. La probabilidad de encontrar un electrón atómico cuya función de onda radial sea $R(r)$, fuera de una esfera de radio r_0 centrada en el núcleo, es

$$\int_{r_0}^{\infty} |R(r)|^2 r^2\,dr$$

La función de onda $R_{10}(r)$ del problema 3 corresponde al estado fundamental de un átomo de hidrógeno, y a_0 es el radio de la órbita de Bohr correspondiente a este estado. *a*) Calcular la probabilidad de encontrar un electrón en estado fundamental en un átomo de hidrógeno a una distancia del núcleo mayor que a_0. *b*) Cuando el electrón en un átomo de hidrógeno en estado fundamental está a $2a_0$ del núcleo, toda su energía es energía potencial. De acuerdo con la física clásica, el electrón no puede exceder la distancia $2a_0$ del núcleo. Hallar la probabilidad de que $r > 2a_0$ para el electrón en un átomo de hidrógeno en estado fundamental.

8. El *teorema de Unsöld* dice que, para cualquier valor del número cuántico orbital l, las densidades de probabilidad, sumadas para todos los estados posibles, desde $m_l = -l$ hasta $m_l = +l$ da una constante independiente de los ángulos θ o ϕ esto es,

$$\sum_{m_l=-l}^{+l} |\Theta|^2|\Phi|^2 = \text{constante}$$

Este teorema significa que todo átomo o ion con subcapa cerrada (sec. 7.5) tiene una distribución simétrica esférica de carga eléctrica. Comprobar el teorema de Unsöld para $l = 0$, $l = 1$, y $l = 2$ con ayuda de la tabla 6.1.

9. Hallar la diferencia de porcentaje entre L y el valor máximo de L_z para un electrón atómico en estados p, d y f.

*10. La regla de selección para transiciones entre estados en un oscilador armónico es $\Delta n = \pm 1$. *a*) Justificar esta regla con argumentos clásicos. *b*) Comprobar, a partir de las funciones de onda aplicables, que las transiciones $n = 1 \rightarrow n = 0$ y $n = 1 \rightarrow n = 2$, son posibles para un oscilador armónico, mientras que $n = 1 \rightarrow n = 3$ está prohibido.

11. Con ayuda de las funciones de onda enumeradas en la tabla 6.1 comprobar que $\Delta l = \pm 1$ para las transiciones $n = 2 \rightarrow n = 1$ en el átomo de hidrógeno.

ATOMOS COMPLEJOS 7

A pesar de la precisión con que la teoría cuántica explica algunas de las propiedades del átomo de hidrógeno y de la elegancia y simplicidad esencial de esta teoría, no puede lograr una descripción completa de este u otros átomos sin la hipótesis posterior del spin electrónico y del principio de exclusión asociado con él. En este capítulo se hará la introducción del papel del spin electrónico en el fenómeno atómico y de las razones por las que el principio de exclusión es la clave para la interpretación de las estructuras de los sistemas atómicos complejos.

7.1 EL SPIN DEL ELECTRON

Comenzaremos citando dos de los más significativos defectos de la teoría que se desarrolló en el capítulo anterior. El primero es el hecho experimental de que muchas líneas espectrales en realidad están formadas por dos líneas separadas, aunque muy próximas entre sí. Un ejemplo de esta *estructura fina* es la primera línea de la serie de Balmer del hidrógeno, producida por la transición entre los niveles $n = 3$ y $n = 2$ en el átomo de hidrógeno. En este caso, la predicción teórica es de una sola línea de longitud de onda 6,563 Å, mientras que en la realidad son dos líneas separadas entre sí por 1.4 Å —es un error muy pequeño, pero también un error importante de la teoría.

La segunda y mayor discrepancia entre la teoría cuántica simple del átomo y los datos experimentales se presenta en el efecto Zeeman. En la Sec. 6.7 vimos que un átomo de hidrógeno de número cuántico magnético xx tiene la energía magnética

$$V_m = m_l \frac{e\hbar}{2m} B \qquad 7.1$$

www.elsolucionario.org

cuando está localizado en un campo magnético de densidad de flujo B. Ahora m_l puede tener $2l+1$ valores de $+l$ a $-l$ pasando por cero, de modo que un estado de número cuántico orbital l se desdobla en $2l+1$ subestados que difieren en una energía de $(e\hbar/2m)B$ cuando el átomo está en un campo magnético. No obstante, puesto que las variaciones de m_l están limitadas a $\Delta m_l = 0, \pm 1$, una línea espectral dada que se produzca en la transición entre dos estados de diferente l se desdobla en solamente tres componentes, como indica la Fig. 7-1. Por tanto, el *efecto Zeeman normal* consiste en el desdoblamiento de una línea espectral de frecuencia ν_0 en tres componentes cuyas frecuencias son

$$\nu_1 = \nu_0 - \frac{e\hbar}{2m}\frac{B}{h} = \nu_0 - \frac{e}{4\pi m}B$$

7.2 Efecto Zeeman normal

$$\nu_2 = \nu_0$$

$$\nu_3 = \nu_0 + \frac{e\hbar}{2m}\frac{B}{h} = \nu_0 + \frac{e}{4\pi m}B$$

Aunque el efecto Zeeman normal sea observado realmente en los espectros de algunos elementos y bajo ciertas circunstancias, lo más frecuente es que no lo sea: cuatro, seis o aun más componentes pueden aparecer, y aun cuando estén presentes tres componentes, su espaciado puede no estar de acuerdo con la Ec. 7.2. En la Fig. 7-2 se muestran varios modelos anómalos Zeeman, junto con las predicciones de la Ec. 7.2.

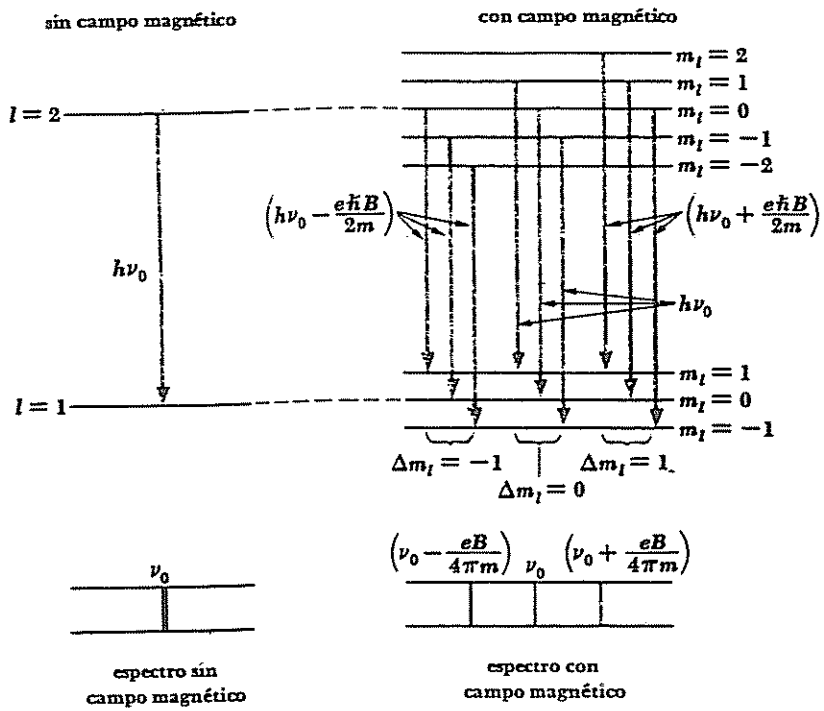


FIGURA 7-1 Efecto Zeeman normal

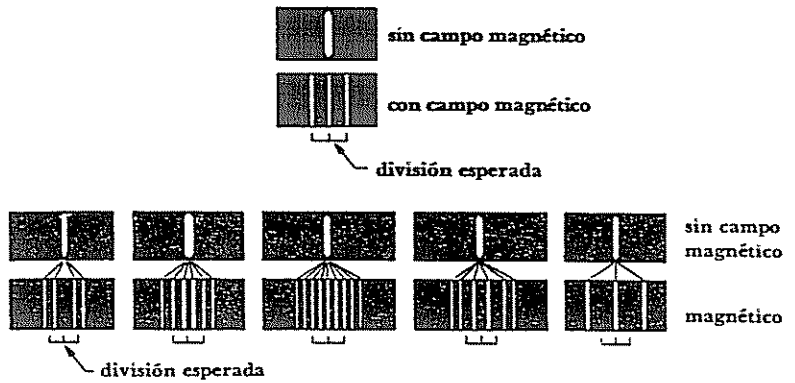


FIGURA 7-2 Efectos Zeeman normal y anómalo en varias líneas espectrales.

En un esfuerzo para explicar la estructura fina de las líneas espectrales y el efecto Zeeman anómalo, S.A. Goudsmit y G.E. Uhlenbeck propusieron, en 1925, que el electrón posee un momentum angular intrínseco, independiente de cualquier momentum angular orbital que pueda tener y, asociado con este momentum angular, un cierto momento magnético. Lo que Goudsmit y Uhlenbeck tenían presente era la imagen clásica de un electrón como una esfera cargada girando sobre un eje. La rotación implica momentum angular y, puesto que el electrón está negativamente cargado, tiene un momentum magnético μ_s que es opuesto en dirección a su vector momentum angular L_s. La noción de spin del electrón resultó ser apropiada no solamente para explicar la estructura fina y el efecto Zeeman anómalo, sino también para una amplia variedad de fenómenos atómicos.

Evidentemente, la idea de que los electrones son esferas cargadas que están girando es difícil que concuerde con la mecánica cuántica; no obstante, Dirac, en 1928, pudo demostrar, sobre la base de un estudio teórico-cuántico, que las partículas que tienen la carga y masa del electrón deben tener exactamente el momentum angular intrínseco y el momento magnético que les atribuyeron Goudsmit y Uhlenbeck.

El número cuántico S se usa para describir el momentum angular de spin del electrón. El único valor que puede tener s es $s = \frac{1}{2}$; esta limitación se desprende de la teoría de Dirac y, como se verá después, también se puede obtener empíricamente a partir de datos espectrales. El módulo S del momentum angular debido al spin del electrón viene dado en función del número cuántico S de spin por la fórmula

$$S = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar$$

7.3 $$= \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$$

que es la misma fórmula con la que se obtiene la magnitud L del momentum angular orbital en función del número cuántico orbital l:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$$

La cuantización espacial del spin del electrón está descrita por el número cuántico magnético de spin m_s. Como el vector momentum angular orbital puede tener $2l + 1$ orientaciones en un campo magnético, desde $+l$ a $-l$, el vector momentum angular de spin puede tener $2s+1=2$ orientaciones, especificadas mediante $m_s = +\frac{1}{2}$ y $m_s = -\frac{1}{2}$ (Fig. 7-3). La componente S_z del momentum angular de spin de un electrón a lo largo de un campo magnético en la

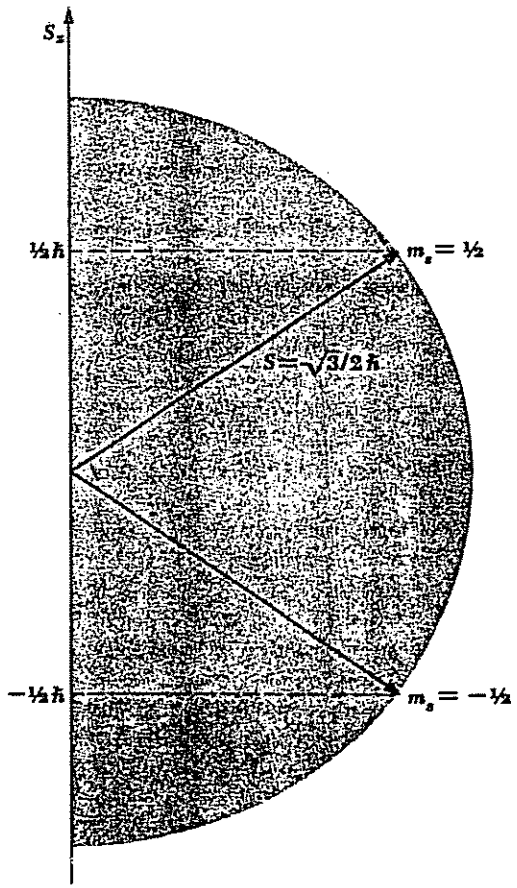


FIGURA 7-3 Dos orientaciones posibles del vector momentum angular de spin.

dirección z está determinada por el número cuántico magnético de spin, de modo que

7.4 $$S_z = m_s\hbar$$
$$= \pm\tfrac{1}{2}\hbar$$

La relación giromagnética característica del spin electrónico es casi exactamente el doble que la del electrón en movimiento orbital. Así, tomando esta relación igual a 2, el momento magnético de spin μ_s de un electrón está relacionado con su momentum angular de spin S por

7.5 $$\mu_s = -\frac{e}{m}S$$

Las posibles componentes de μ_s a lo largo de cualquier eje, por ejemplo el eje z, están limitadas a

7.6 $$\mu_{sz} = \pm\frac{e\hbar}{2m}$$

El término $(e\hbar/2m)$ se conoce como el magnetón de Bohr.

La cuantización del espacio la demostraron explícitamente, por primera vez, O. Stern y W. Gerlach en 1921. Dirigieron un haz de átomos de plata neutros desde un horno a través de un conjunto de ranuras de colimación hacia un campo magnético no homogéneo (Fig. 7-4). Una placa fotográfica recogió la configuración del haz después de su paso a través del campo. En su estado normal, el momento magnético completo de un átomo de plata se debe al spin de uno de sus electrones. En un campo magnético uniforme, un dipolo de este tipo experimentaría sencillamente una torca tendiente a alinearlo con el campo. Sin embargo, en un campo no homogéneo, cada "polo" del dipolo está sujeto a una fuerza de magnitud diferente, y, por tanto, hay una fuerza resultante sobre el dipolo que varía con su orientación con respecto al campo. De acuerdo con la física clásica, todas las orientaciones deben estar presentes en un haz de átomos, lo que daría un trazo grueso sobre la placa fotográfica en lugar de la línea delgada que se forma en ausencia de cualquier campo magnético. No obstante, Stern y Gerlach encontraron que el haz inicial se desdoblaba en dos partes diferentes, correspondiendo a las dos orientaciones opuestas de spin en el campo magnético que la cuantización del espacio permite.

7.2 ACOPLAMIENTO ORBITA-SPIN

La estructura fina de dobletes de las líneas espectrales se puede explicar sobre la base de una interacción magnética entre el momentum angular orbital y de spin de los electrones atómicos. Este acoplamiento spin-órbita se puede comprender directamente en función de un modelo clásico. Un electrón que

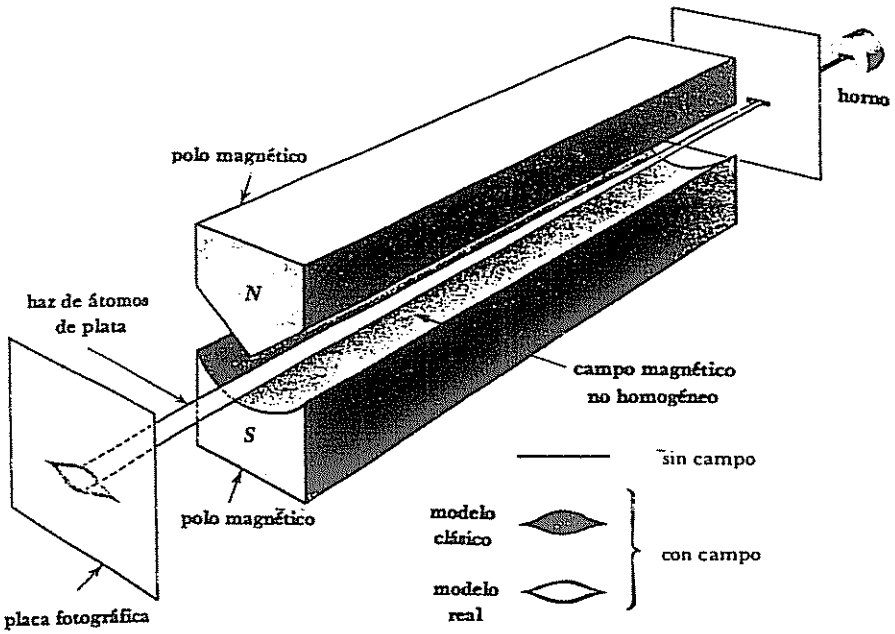


FIGURA 7-4 Experimento de Stern-Gerlach.

gira alrededor de un protón se encuentra en un campo magnético ya que, en su propio sistema de referencia, el protón está circulando alrededor de *él*. Este campo magnético actúa sobre el momento magnético de spin de los propios electrones para producir una especie de efecto Zeeman interno. La energía V_m de un dipolo magnético de momento μ en un campo magnético de densidad de flujo **B** es, en general,

7.7 $$V_m = -\mu B \cos\theta$$

donde θ es el ángulo entre μ y **B**. El término $\mu \cos\theta$ es la componente de μ paralela a **B** que, en el caso del momento magnético de spin del electrón, es μ_{sz}. Por tanto, aceptando que

$$\mu \cos\theta = \mu_{sz} = \pm\frac{e\hbar}{2m}$$

tenemos que

7.8 $$V_m = \pm\frac{e\hbar}{2m}B$$

Dependiendo de la orientación de su vector de spin, la energía de un electrón en un estado atómico dado será mayor o menor, según $(e\hbar/2m)B$, que es su energía

y en ausencia del acoplamiento spin-órbita. El resultado es el desdoblamiento de cada estado cuántico (excepto los estados *s*) en dos subestados separados y, en consecuencia, el desdoblamiento de cada línea espectral en dos líneas componentes.

La asignación de $s = \frac{1}{2}$ es la única que se conforma con la doble estructura fina observada. El hecho de que lo que sería un solo estado son en realidad dos, impone la condición de que las $2s + 1$ orientaciones posibles del vector momentum angular de spin **S** son 2 en total. Por tanto,

$$2s + 1 = 2$$
$$s = \tfrac{1}{2}$$

Para comprobar si la estructura fina que se observa en la línea espectral corresponde a la variación de energía de la Ec. 7.8, debemos calcular la magnitud B del campo magnético que experimenta un electrón atómico. Una estimación se obtiene fácilmente. Una espira circular de radio r que conduce la corriente i, tiene un campo magnético de densidad de flujo en su centro de

$$B = \frac{\mu_0 i}{2r}$$

Un electrón orbital, sea el caso del átomo de hidrógeno, se "ve" a sí mismo rodeado f veces por segundo, por un protón de carga $+e$, resultando así una densidad de flujo de

$$B = \frac{\mu_0 f e}{2r}$$

En el átomo de Bohr en estado fundamental $f = 6.8 \times 10^{15}$ y $r = 5.3 \times 10^{-11}$ m, de modo que

$$B \approx 13\ \text{T}$$

que es un campo muy fuerte. El valor del magnetón de Bohr es

$$\frac{e\hbar}{2m} = 9.27 \times 10^{-24}\ \text{J/T}$$

Por tanto, la energía magnética V_m de tal electrón es, a partir de la Ec. 7.8,

$$V_m = \frac{e\hbar}{2m}B$$
$$\approx 9.27 \times 10^{-24}\ \text{J/T} \times 13\ \text{T}$$
$$\approx 1.2 \times 10^{-22}\ \text{J}$$

La variación de longitud de onda correspondiente a este cambio de energía es de aproximadamente 2 Å para una línea espectral de longitud de onda no perturbada de 6,563 Å, que es ligeramente mayor que el desdoblamiento

www.elsolucionario.org

observado de la línea de origen en la transición $n = 3 \rightarrow n = 2$. Sin embargo, la densidad de flujo del campo magnético en órbitas superiores es menor que para órbitas en estado fundamental, lo que explica la discrepancia.

7.3 EL PRINCIPIO DE EXCLUSION

En la configuración normal de un átomo de hidrógeno, el electrón está en su estado cuántico más bajo. ¿Cuáles son las configuraciones normales de átomos más complejos? ¿Están los 92 electrones del átomo de uranio en el mismo estado cuántico, suponiendo que giran alrededor del núcleo, agrupados en una sola órbita de Bohr? Muchos hechos evidentes hacen improbable esta hipótesis. Un ejemplo de ello es la gran diferencia en el comportamiento químico que muestran ciertos elementos cuyas estructuras atómicas difieren en un electrón: por ejemplo, los elementos que tienen números atómicos 9, 10 y 11 son, respectivamente, el flúor halógeno gaseoso, el gas inerte neón y el álcali sodio metálico. Puesto que la estructura electrónica de un átomo controla sus interacciones con otros átomos, es difícil comprender por qué las propiedades químicas de los elementos cambian tan bruscamente con una pequeña variación en el número atómico, si todos los electrones del átomo están juntos en el mismo estado cuántico.

En 1925, Wolfgang Pauli descubrió el principio fundamental que rige las configuraciones electrónicas de los átomos que tienen más de un electrón. El *principio de exclusión* establece que **no pueden existir en el átomo dos electrones en el mismo estado cuántico.** Cada electrón en el átomo debe tener una serie diferente de números cuánticos n, l, m_l, m_s.

Pauli llegó a esta conclusión a partir de un estudio de los espectros atómicos. Es posible determinar los diversos estados de un átomo por medio de su espectro, de modo que se pueden deducir los números cuánticos de estos estados. En el espectro de cada elemento, excepto el hidrógeno, *falta* una serie de líneas que corresponden a las transiciones a, o desde, estados que tienen ciertas combinaciones de números cuánticos. Por ello, no se observan transiciones en el helio a, o desde, el estado de configuración fundamental en el que los spines de los dos electrones tienen la misma dirección para dar un spin total de 1, aunque *se observan* transiciones hacia y de las otras configuraciones de estado fundamental, en las que los spines están en direcciones opuestas, para dar un spin total de 0. En el estado en que no se presentan los números cuánticos de *ambos* electrones serían $n = 1$, $l = 0$, $m_l = 0$, $m_s = \frac{1}{2}$, mientras que en el estado conocido, uno de los electrones tiene $m_s = \frac{1}{2}$ y el otro $m_s = -\frac{1}{2}$. Pauli demostró que cada estado atómico no observado supone dos o más electrones con números cuánticos idénticos, y el principio de exclusión es una confirmación de este descubrimiento empírico.

Antes de explorar el papel del principio de exclusión en la determinación de las estructuras atómicas, consideremos sus relaciones mecanocuánticas. En el

capítulo anterior vimos que la función de onda completa ψ del electrón en un átomo de hidrógeno, se puede expresar por el producto de tres funciones de onda separadas, cada una de las cuales describe esa parte de ψ que es función de cada una de las tres coordenadas r, θ y ϕ. De manera análoga, es posible demostrar que la función de onda completa $\psi(1, 2, 3, \ldots, n)$ de un sistema de n partículas se puede expresar, aproximadamente, como el producto de las funciones de onda $\psi(1), \psi(2), \psi(3), \ldots, \psi(n)$ de las partículas individuales. Esto es

$$\psi(1, 2, 3, \ldots, n) = \psi(1)\,\psi(2)\,\psi(3)\ldots\psi(n) \tag{7.9}$$

Utilizaremos este resultado para investigar el tipo de funciones de onda que se puede utilizar para describir un sistema de dos partículas idénticas.

Supongamos que una de las partículas está en el estado cuántico a y la otra en el b. Puesto que las partículas son idénticas, no habrá diferencia en la densidad de probabilidad $|\psi|^2$ del sistema si se intercambiasen las partículas, sustituyendo la del estado b por la del a, y viceversa. Simbólicamente, se requiere que

$$|\psi|^2(1,2) = |\psi|^2(2,1) \tag{7.10}$$

Por tanto, la función de onda $\psi(2,1)$, que representa las partículas combinadas, se puede expresar.

$$\psi(2,1) = \psi(1,2) \qquad \text{Simétrica} \tag{7.11}$$

o bien,

$$\psi(2,1) = -\psi(1,2) \qquad \text{Antisimétrica} \tag{7.12}$$

y cumplir todavía la Ec. 7.10. La función de onda del sistema no es una cantidad mensurable en sí, y por eso se puede alterar el signo por el cambio de las partículas. Las funciones de onda no alteradas por un cambio de partículas se dice que son *simétricas*, mientras que las que invierten el signo por el cambio son *antisimétricas*.

Si la partícula 1 está en el estado a y la 2 en el b, la función de onda del sistema es, de acuerdo con la Ec. 7.9,

$$\psi_{\mathrm{I}} = \psi_a(1)\,\psi_b(2) \tag{7.13a}$$

mientras que si la partícula 2 está en el estado a y la 1 en el b, la función de onda es

$$\psi_{\mathrm{II}} = \psi_a(2)\,\psi_b(1) \tag{7.13b}$$

Puesto que las dos partículas, de hecho, no se pueden distinguir, no hay manera de conocer en un momento dado si ψ_{I} o bien ψ_{II} describen el sistema. La posibilidad de que ψ_{I} sea correcta en un instante es la misma de que lo sea ψ_{II}. Por tanto, podemos decir que el sistema invierte la mitad del tiempo en la configuración cuya función de onda es ψ_{II}. Así, una combinación lineal de ψ_{I} y ψ_{II} es la descripción apropiada del sistema. Hay dos combinaciones posibles—la simétrica,

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(1)\,\psi_b(2) + \psi_a(2)\,\psi_b(1)] \tag{7.14}$$

y la antisimétrica

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(1)\,\psi_b(2) - \psi_a(2)\,\psi_b(1)] \tag{7.15}$$

Se requiere el factor $1/\sqrt{2}$ para normalizar ψ_S y ψ_A. Intercambiando las partículas 1 y 2, ψ_S no se verá afectado, mientras que cambia el signo de ψ_A. ψ_S y ψ_A cumplen la Ec. 7.10

Existe un número de distinciones importantes entre el comportamiento de las partículas en sistemas cuyas funciones de onda son simétricas y el de aquellas cuyas funciones son antisimétricas. El más evidente es que, en el primer caso, las dos partículas 1 y 2 pueden existir simultáneamente en el mismo estado, con $a = b$, mientras que en el último caso, si $a = b$, tenemos que $\psi_A = 0$: las dos partículas no pueden estar en el mismo estado cuántico. Comparando esto con el principio empírico de exclusión de Pauli, que establece que dos electrones no pueden estar en un átomo en el mismo estado cuántico, se concluye que los sistemas de electrones están descritos por funciones de onda que cambian de signo al intercambiar entre sí una pareja de ellos.

Los resultados de distintos experimentos demuestran que *todas* las partículas que tienen spin ½ poseen funciones de onda que son antisimétricas para un cambio de cualquier par de ellas; esas partículas, incluyendo los protones, los neutrones y los electrones, cumplen el principio de exclusión cuando están en el mismo sistema; esto es, cuando se mueven en un campo de fuerzas común, cada miembro debe estar en un estado cuántico diferente. A las partículas de spin ½ se les denomina *partículas de Fermi* o *fermiones* ya que (ver Cap. 9) el comportamiento de sus agregados está regido por leyes de distribución estadística, descubiertas por Fermi y Dirac.

Las partículas cuyo spin es 0, o bien, un número entero, tienen funciones de onda que son simétricas para el intercambio de dos de ellas. Estas partículas no obedecen al principio de exclusión. Comúnmente se hace referencia a ellas como *partículas de Bose* o *bosones*, porque la ley de distribución estadística que describe sus agregados fue descubierta por Bose y Einstein. Los fotones, las partículas alfa y los átomos de helio son partículas de Bose.

Hay otras consecuencias importantes de la simetría o antisimetría de las funciones de onda de partículas, además de la que se expresa en el principio de exclusión. Estas consecuencias son útiles para clasificar las partículas de acuerdo con la naturaleza de sus funciones de onda, en lugar de hacerlo simplemente por si cumplen o no el principio de exclusión.

7.4 CONFIGURACIONES ELECTRONICAS

Dos reglas básicas determinan la estructura de los átomos complejos:

1. Un sistema de partículas es estable cuando su energía total es un mínimo.

2. Unicamente puede existir un electrón en cualquier estado cuántico particular de un átomo.

Antes de aplicar estas reglas a los átomos reales, estudiemos la variación de la energía del electrón con el estado cuántico.

Aunque los diversos electrones en un átomo complejo interactúan directamente, se puede comprender gran parte de la estructura atómica simplemente considerando a cada electrón como si existiera en un campo medio de fuerzas constantes. Para un electrón dado, este campo es el campo eléctrico de la carga nuclear Ze, disminuido por el blindaje parcial de aquellos otros electrones que están más próximos al núcleo. Todos los electrones que tienen el mismo número cuántico total n están, por término medio, aproximadamente a la misma distancia del núcleo. Estos electrones interactúan virtualmente con el mismo campo eléctrico y tienen energías similares. Normalmente, se dice que tales electrones ocupan la misma *capa* atómica. Las capas se denotan por letras mayúsculas, de acuerdo con el siguiente esquema

Capas atómicas

$n =$	1	2	3	4	5 . . .
	K	L	M	N	O . . .

La energía de un electrón en una capa determinada depende también, hasta cierto límite, de su número cuántico orbital l, aunque esta dependencia no sea tan grande como la de n. En un átomo complejo, el grado en que la carga nuclear completa está blindada para un electrón dado, por la intervención de capas de otros electrones, varía con su distribución de densidad de probabilidad. Un electrón de l pequeño es más probable que se encuentre cerca del núcleo (donde está débilmente blindado por los demás electrones) que otro de l mayor (Fig. 6.11), lo que supone una energía total más baja (esto es, una energía de enlace más alta). Los electrones en cada capa aumentan en energía al aumentar l. Este efecto se representa en la Fig. 7-5, que es una representación gráfica de las energías de enlace de varios electrones atómicos en función del número atómico.

Los electrones que comparten un cierto valor de l en una capa, se dice que ocupan la misma *subcapa*. Todos los electrones en una subcapa tienen casi idéntica energía, ya que la dependencia de la energía del electrón de m_l y m_s es comparativamente menor.

El grado de ocupación de las distintas subcapas en un átomo se expresa normalmente con la ayuda de la notación que se presentó en el capítulo anterior para los diversos estados cuánticos del átomo de hidrógeno. De acuerdo con la Tabla 6.2, cada subcapa se identifica mediante su número cuántico total n, seguido de la letra correspondiente a su número cuántico orbital l. Un número superior después de la letra indica el número de electrones en aquella subcapa. Por ejemplo, la configuración electrónica del sodio es

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$$

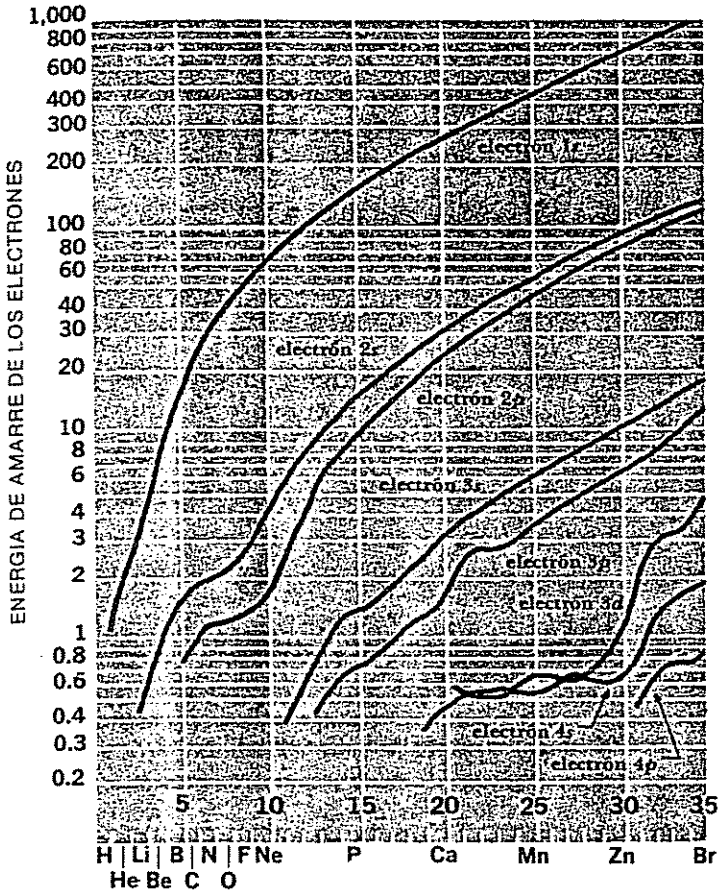


FIGURA 7-5 Las energías de enlace de los eléctrones atómicos en Ry. (1 Ry = 1 rydberg = 13.6 eV =

lo que significa que las subcapas $1s$ $(n = 1, l = 0)$ y $2s$ $(n = 2, l = 0)$ contienen dos electrones cada una, la subcapa $2p$ $(n = 2, l = 1)$ contiene seis electrones y la $3s$ $(n = 3, l = 0)$ un solo electrón.

7.5 SISTEMA PERIODICO

Cuando se ordenan los elementos por su número atómico, los que tienen propiedades químicas y físicas similares aparecen a intervalos regulares. Esta observación empírica, conocida como *ley periódica*, la formuló por primera vez

Dmitri Mendeleev hace aproximadamente un siglo. La distribución tabulada de los elementos que muestra esta secuencia recibe el nombre de *sistema periódico*. La Tabla 7.1 es tal vez la forma más simple del sistema periódico; aunque se han hecho sistemas periódicos más elaborados para mostrar con mayor detalle la ley periódica, esta tabla es adecuada para nuestro propósito.

Los elementos con propiedades similares forman los *grupos* que constituyen las columnas verticales de la Tabla 7.1. Así, el grupo I está formado por el hidrógeno y los metales alcalinos, que tienen todos una gran actividad química y una valencia de +1. El grupo VII lo constituyen los halógenos, que son no metales muy activos, volátiles y de valencia −1 y forman moléculas diatómicas en estado gaseoso. El Grupo VIII lo forman los gases inertes que son tan inactivos que no solamente casi nunca forman compuestos con otros elementos, sino que sus átomos no se unen entre sí en moléculas, como la hacen los átomos de otros gases.

Las líneas horizontales de la Tabla 7.1 se llaman *periodos*. A través de cada periodo hay una transición más o menos uniforme, desde un metal activo hasta un gas inerte, pasando por metales menos activos, no metales débilmente activos y no metales muy activos. Dentro de cada columna hay también cambios regulares en las propiedades, pero son menos notables que las de los periodos. Por ejemplo, el aumento del número atómico en los metales alcalinos está acompañado por una mayor actividad química, mientras que el fenómeno inverso se presenta en los halógenos.

Una serie de *elementos de transición* aparece en cada periodo, entre los elementos de los grupos II y III. Los elementos de transición son metales con un parecido químico notable entre sí, pero no con los elementos de los grupos mayores. Quince de los elementos de transición del periodo 6 son virtualmente indistinguibles por sus propiedades, y se les conoce como *lantánidos* (o *tierras raras*). Un grupo similar de metales muy vinculados entre sí lo constituyen los *actínidos*, que se encuentran en el periodo 7.

El concepto de capa y subcapa encaja perfectamente en el modelo del sistema periódico, que es un reflejo de las estructuras de los elementos. Veamos cómo se constituye este modelo.

El principio de exclusión define límites concretos al número de electrones que pueden ocupar una subcapa dada. Esta subcapa se caracteriza por un cierto número cuántico total n y por otro orbital l, donde

$$l = 0, 1, 2, \ldots, (n - 1)$$

Hay $2l + 1$ valores diferentes del número cuántico magnético m_l para cada uno de l, ya que

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$$

y dos valores posibles del número cuántico magnético de spin m_s $(+\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2})$ para cada uno de m_l. Por tanto, cada subcapa puede contener un máximo de electrones $2(2l + 1)$, y cada capa un máximo de

www.elsolucionario.org

TABLA PERIODICA DE LOS ELEMENTOS. El número que se encuentra arriba del símbolo de cada elemento es su número atómico, y el de abajo es su número de masa en u. No se presentan en la naturaleza los elementos cuyas masas atómicas están entre paréntesis, pero se han obtenido artificialmente en reacciones nucleares. La masa atómica, en este caso, es el número de masa del isótopo radiactivo de vida más larga del elemento.

período	grupo I	grupo II	grupo III	grupo IV	grupo V	grupo VI	grupo VII	grupo VIII
1	1 H 1.00							2 He 4.00
2	3 Li 6.94	4 Be 9.01	5 B 10.81	6 C 12.01	7 N 14.01	8 O 16.00	9 F 19.00	10 Ne 20.18
3	11 Na 22.99	12 Mg 24.31	13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.98	16 S 32.07	17 Cl 35.46	18 Ar 39.94
4	19 K 39.10	20 Ca 40.08	21 Sc 44.96	22 Ti 47.90	23 V 50.94	24 Cr 52.00	25 Mn 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.93	28 Ni 58.71	29 Cu 63.54	30 Zn 65.37	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.92	34 Se 78.96	35 Br 79.91	36 Kr 83.8
5	37 Rb 85.47	38 Sr 87.66	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc (99)	44 Ru 101.1	45 Rh 102.91	46 Pd 106.4	47 Ag 107.87	48 Cd 112.40	49 In 114.82	50 Sn 118.69	51 Sb 121.75	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.30
6	55 Cs 132.91	56 Ba 137.34	57–71 *	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.85	75 Re 186.2	76 Os 190.2	77 Ir 192.2	78 Pt 195.09	79 Au 197.0	80 Hg 200.59	81 Tl 204.37	82 Pb 207.19	83 Bi 208.98	84 Po (210)	85 At (210)	86 Rn 222
7	87 Fr (223)	88 Ra 226.05	89–103 **															

* Tierra raras

57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.35	63 Eu 152.0	64 Gd 157.25	65 Tb 158.92	66 Dy 162.50	67 Ho 164.92	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97
89 Ac 227	90 Th 232.04	91 Pa 231	92 U 238.03	93 Np (237)	94 Pu (242)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (249)	98 Cf (251)	99 Es (254)	100 Fm (253)	101 Md (256)	102 No (254)	103 Lw (257)

** Actínidos

$$\sum_{l=0}^{l=n-1} 2(2l+1) = 2[1 + 3 + 5 + \cdots + 2(n-1) + 1]$$

$$= 2[1 + 3 + 5 + \cdots + 2n - 1]$$

La cantidad entre corchetes contiene n términos, cuyo valor promedio es $\frac{1}{2}[1 + (2n - 1)]$, de manera que el número máximo de electrones en la capa n-ésima es

$$2 \times \frac{n}{2}[1 + (2n - 1)] = 2n^2.$$

La capa o subcapa que contiene el número total de electrones, se dice que está completa. Una subcapa s completa ($l = 0$) tiene dos electrones; una p ($l = 1$) seis electrones; una ($l = 2$) diez electrones, y así sucesivamente.

Los momenta angulares orbital total y de spin de los electrones, en una subcapa completa, son igual a cero, y la distribución efectiva de su carga es perfectamente simétrica. (Ver problema 8 del capítulo 6.) Los electrones en una capa completa están todos estrechamente unidos, ya que la carga positiva del núcleo es grande, comparada con la carga negativa de los electrones de blindaje interiores (Fig. 7-6). Como un átomo que contiene solamente capas completas no tiene momento dipolar, no atrae a otros electrones y sus electrones no pueden separarse fácilmente. Es de esperar que estos átomos sean químicamente pasivos como los gases inertes —los gases inertes tienen todos configuraciones electrónicas de capas completas o equivalentes.

Los átomos que tienen un solo electrón en sus capas más externas, tienden a perderlo. Este electrón está relativamente alejado del núcleo y queda blindado por los electrones más cercanos al núcleo, de manera que sólo siente una carga efectiva del núcleo $+e$. El hidrógeno y los metales alcalinos están dentro de esta categoría y su valencia es, por tanto, $+1$. Los átomos a cuya capa externa le falta un electrón para estar completa, tienden a adquirir este electrón por medio de la atracción de la fuerte carga nuclear imperfectamente blindada; así se explica el comportamiento químico de los halógenos. De esta manera se pueden comprender las semejanzas de los miembros de los diferentes grupos del sistema periódico.

La Tabla 7-2 muestra las configuraciones electrónicas de los elementos. El origen de los elementos de transición se encuentra en la unión más estrecha de los electrones s que la de los d o f en los átomos complejos, que se estudió en la sección anterior. El primer elemento que muestra este efecto es el potasio, cuyo electrón exterior está en un subestado $4s$, en lugar de un subestado $3d$. La diferencia de energía de unión entre electrones $3d$ y $4s$ no es muy grande, como se puede apreciar en las configuraciones del cromo y del cobre. En estos dos elementos, un electrón adicional $3d$ está presente a costa de una vacante en la subcapa $4s$. En relación con esto, será de utilidad consultar otra vez la Fig. 7-5.

El orden en el que las subcapas de electrones están llenas en los átomos es,

$$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 6d$$

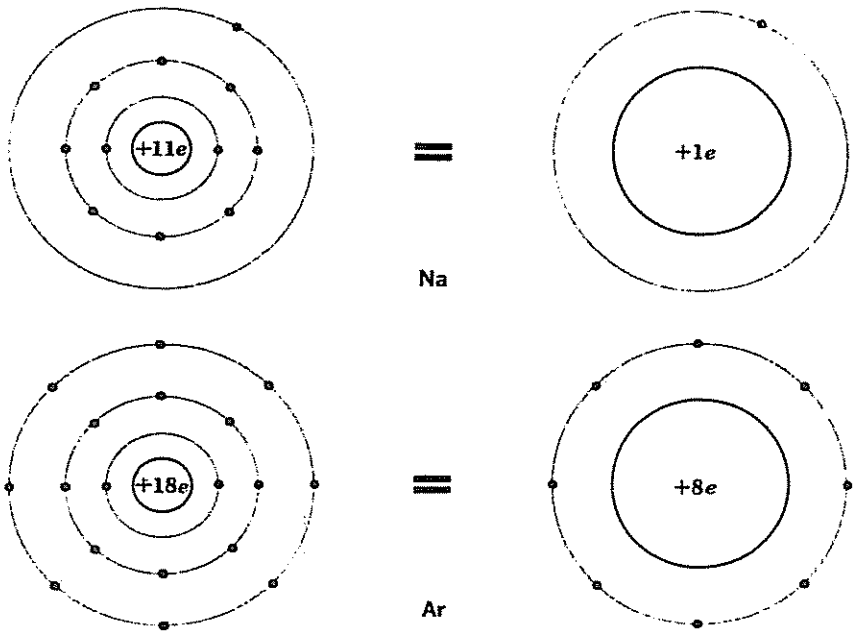


FIGURA 7-6 Blindaje de electrones en el sodio y el argón. Cada electrón externo en un átomo de Ar recibe la influencia de una carga nuclear efectiva 8 veces mayor que la que influye sobre el electron externo en un átomo de Na, aun cuando los electrones exteriores en ambos casos se encuentran en la capa M ($n = 3$).

como se puede observar en la Tabla 7.2 y en la Fig. 7-7. Las notables semejanzas en el comportamiento químico entre los lantánidos y actínidos se comprenden también fácilmente a base de esta secuencia. Todos los lantánidos tienen las mismas configuraciones $5s^2 5p^6 6s^2$, pero tienen incompleta la subcapa $4f$. La adición de electrones $4f$ no tiene efecto realmente sobre las propiedades de los lantánidos, que están determinadas principalmente por los electrones exteriores. En forma similar, los actínidos tienen configuraciones idénticas $6s^2$ a $7s^2$ y difieren solamente en el número de sus electrones $5f$ y $6d$.

Estas irregularidades en las energías de enlace de los electrones atómicos son también responsables de la falta de capas externas completamente llenas en los gases inertes más pesados. El helio ($Z = 2$) y el neón ($Z = 10$) contienen respectivamente capas K y L completas, pero el argón ($Z = 18$) tiene únicamente 8 electrones en su capa M, correspondientes a subcapas completas $3s$ y $3p$. La razón de que la subcapa $3d$ no esté llena se debe sencillamente a que los electrones $4s$ tienen energía de enlace mayor que los electrones $3d$ y, en consecuencia, la subcapa $4s$ se llena primero en el potasio y en el calcio. Como

Tabla 7-2

CONFIGURACIONES ELECTRONICAS DE LOS ELEMENTOS

	K	L		M			N				O				P			Q
	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s
1 H	1																	
2 He	2																	
3 Li	2	1																
4 Be	2	2																
5 B	2	2	1															
6 C	2	2	2															
7 N	2	2	3															
8 O	2	2	4															
9 F	2	2	5															
10 Ne	2	2	6															
11 Na	2	2	6	1														
12 Mg	2	2	6	2														
13 Al	2	2	6	2	1													
14 Si	2	2	6	2	2													
15 P	2	2	6	2	3													
16 S	2	2	6	2	4													
17 Cl	2	2	6	2	5													
18 A	2	2	6	2	6													
19 K	2	2	6	2	6		1											
20 Ca	2	2	6	2	6		2											
21 Sc	2	2	6	2	6	1	2											
22 Ti	2	2	6	2	6	2	2											
23 V	2	2	6	2	6	3	2											
24 Cr	2	2	6	2	6	5	1											
25 Mn	2	2	6	2	6	5	2											
26 Fe	2	2	6	2	6	6	2											
27 Co	2	2	6	2	6	7	2											
28 Ni	2	2	6	2	6	8	2											
29 Cu	2	2	6	2	6	10	1											
30 Zn	2	2	6	2	6	10	2											
31 Ga	2	2	6	2	6	10	2	1										
32 Ge	2	2	6	2	6	10	2	2										
33 As	2	2	6	2	6	10	2	3										
34 Se	2	2	6	2	6	10	2	4										
35 Br	2	2	6	2	6	10	2	5										
36 Kr	2	2	6	2	6	10	2	6										
37 Rb	2	2	6	2	6	10	2	6			1							
38 Sr	2	2	6	2	6	10	2	6			2							
39 Y	2	2	6	2	6	10	2	6	1		2							
40 Zr	2	2	6	2	6	10	2	6	2		2							
41 Nb	2	2	6	2	6	10	2	6	4		1							
42 Mo	2	2	6	2	6	10	2	6	5		1							
43 Tc	2	2	6	2	6	10	2	6	5		2							
44 Ru	2	2	6	2	6	10	2	6	7		1							
45 Rh	2	2	6	2	6	10	2	6	8		1							
46 Pd	2	2	6	2	6	10	2	6	10									
47 Ag	2	2	6	2	6	10	2	6	10		1							
48 Cd	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2							
49 In	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	1						
50 Sn	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	2						
51 Sb	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	3						

Tabla 7-2 (Continuación)

	K	L		M			N				O				P			Q
	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s
52 Te	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	4						
53 I	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	5						
54 Xe	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6						
55 Cs	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			1			
56 Ba	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
57 La	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6	1		2			
58 Ce	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	2	6			2			
59 Pr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	3	2	6			2			
60 Nd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	4	2	6			2			
61 Pm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	5	2	6			2			
62 Sm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	6	2	6			2			
63 Eu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	7	2	6			2			
64 Gd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	7	2	6	1		2			
65 Tb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	9	2	6			2			
66 Dy	2	2	6	2	6	10	2	6	10	10	2	6			2			
67 Ho	2	2	6	2	6	10	2	6	10	11	2	6			2			
68 Er	2	2	6	2	6	10	2	6	10	12	2	6			2			
69 Tm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	13	2	6			2			
70 Yb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6			2			
71 Lu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	1		2			
72 Hf	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	2		2			
73 Ta	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	3		2			
74 W	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	4		2			
75 Re	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	5		2			
76 Os	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	6		2			
77 Ir	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	7		2			
78 Pt	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	9		1			
79 Au	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		1			
80 Hg	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2			
81 Tl	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	1		
82 Pb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	2		
83 Bi	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	3		
84 Po	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	4		
85 At	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	5		
86 Rn	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6		
87 Fr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6		1
88 Ra	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6		2
89 Ac	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	1	2
90 Th	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	2	2
91 Pa	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	2	6	1	2
92 U	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	3	2	6	1	2
93 Np	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	4	2	6	1	2
94 Pu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	5	2	6	1	2
95 Am	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	6	2	6	1	2
96 Cm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	7	2	6	1	2
97 Bk	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	8	2	6	1	2
98 Cf	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	10	2	6		2
99 E	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	11	2	6		2
100 Fm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	12	2	6		2
101 Md	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	13	2	6		2
102 No	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6		2
103 Lw	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	1	2

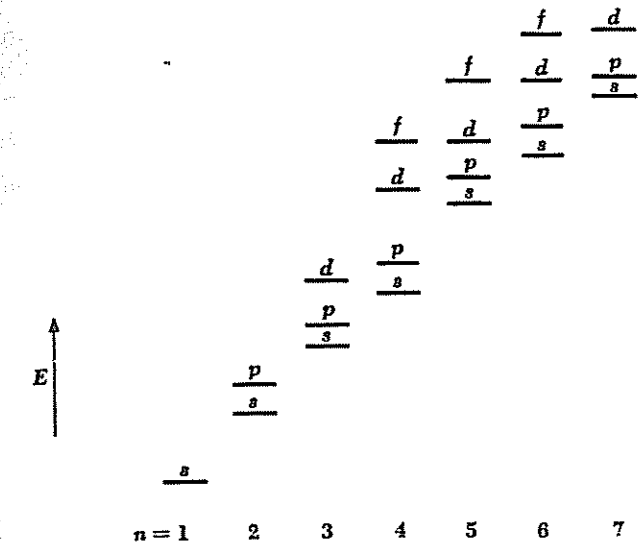


Figura 7-7 Secuencia de los estados cuánticos en un àtomo. (No està a escala.)

la subcapa $3d$ se llena en elementos de transición sucesivamente más pesados, hay uno o dos electrones $4s$ exteriores que hacen posible la actividad química. No se llega a otro gas inerte hasta el kriptón ($Z = 36$), y aquí también se encuentra una capa externa igualmente incompleta con sólo las subcapas $4s$ y $4p$ llenas. Al kriptón le sigue el rubidio ($Z = 37$), que omite las capas $4d$ y $4f$ para tener un electrón $5s$. El siguiente gas inerte es el zenón ($Z = 54$), que ha llenado las subcargas $4d$, $5s$ y $5p$, pero que tiene vacía la subcapa interior $4f$, así como la $5d$ y $5f$. Se repite el mismo modelo con los restantes gases inertes.

Aunque hemos repasado solamente algunas de las propiedades químicas y físicas de los elementos en función de su configuración electrónica, podemos interpretar cuantitativamente muchas más mediante un razonamiento similar.

7.6 LA REGLA DE HUND

En general, los electrones en un átomo permanecen desapareados (esto es, tienen spines paralelos) siempre que es posible. Este principio recibe el nombre de *regla de Hund*. El ferromagnetismo del fierro, el cobalto y el níquel es una consecuencia de la regla de Hund: sus subcapas $3d$ están ocupadas sólo parcialmente, y los electrones en estas subcapas no se aparean para permitir que sus momentos magnéticos de spin se cancelen. En el fierro, por ejemplo, cinco de los seis electrones $3d$ tienen spines paralelos, de manera que el átomo de fierro posee un momento magnético resultante grande. Examinaremos otras consecuencias de la regla de Hund, Cap. 9 respecto del enlace molecular.

www.elsolucionario.org

El origen de la regla de Hund se basa en la repulsión mutua de los electrones atómicos. Debido a esta repulsión, cuanto más distanciados están los electrones en un átomo, más baja es la energía de éste. Los electrones en la misma subcapa con el mismo spin deben tener distintos valores de m_l y, de acuerdo con ello, son descritos por funciones de onda cuyas distribuciones espaciales son diferentes. Electrones con spines paralelos están, por tanto, más separados en el espacio que si estuvieran apareados, y esta disposición, de menor energía, es la más estable.

*7.7 EL MOMENTUM ANGULAR TOTAL

Cada electrón en un átomo tiene un cierto momentum angular orbital **L** y un cierto momentum angular de spin **S**, que contribuyen al momentum angular total **J** del átomo. Como todo momentum angular, **J** está cuantizado, con una magnitud dada por

7.16 $$J = \sqrt{J(J+1)}\,\hbar$$ Momentum angular total del átomo

y una componente J_z en la dirección z dada por

7.17 $$J_z = M_J \hbar$$ Componente z del momentum angular total del átomo

donde J y M_J son números cuánticos que gobiernan a J y a J_z. Nuestra tarea en el resto de este capítulo será estudiar las propiedades de **J** y sus efectos en los fenómenos atómicos. Esto lo haremos en función del *modelo vectorial* semiclasico del átomo, que proporciona un sistema más intuitivo para comprender las consideraciones del momentum angular que el método puramente mecánico-cuántico.

Consideremos primero un átomo cuyo momentum angular total proviene de un solo electrón. Los átomos de los elementos del grupo I de la tabla periódica—hidrógeno, litio, sodio, etc. — son de esta clase, ya que tienen un solo electrón fuera de las capas interiores completas (excepto el hidrógeno, que no tiene electrones interiores), y el principio de exclusión afirma que el momentum angular total y el momento magnético de las capas completas son cero. También en esta categoría están los iones He^+, Be^+, Mg^+, B^{++}, Al^{++}, etc.

La magnitud L del momentum angular orbital **L** de un electrón de un átomo está determinada por su número cuántico orbital l, de acuerdo con la fórmula

7.18 $$L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$$

mientras que la componente L_z de **L** de acuerdo con el eje z, viene determinada por el número cuántico magnético m_l de acuerdo con la fórmula

7.19 $$L_z = m_l \hbar$$

Del mismo modo, la magnitud S del momentum angular de spín S está determinada por el número cuántico de spin s (que tiene como valor único $+\frac{1}{2}$) según la fórmula

7.20 $$S = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar$$

mientras que la componente S_z de **S** de acuerdo con el eje z, se define por el número cuántico magnético de spin m_s según la fórmula

7.21 $$S_z = m_s \hbar$$

Como **L** y **S** son vectores, se deben sumar vectorialmente para obtener el momentum angular total **J**:

7.22 $$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

Comúnmente se utiliza el símbolo j y m_j para los números cuánticos que definen a J y J_z para un solo electrón, de manera que

7.23 $$J = \sqrt{j(j+1)}\,\hbar$$

7.24 $$J_z = m_j \hbar$$

Para obtener las relaciones entre los diversos números cuánticos del momentum angular, lo más sencillo es partir de las componentes z de los vectores **J**, **L** y **S**. Ya que J_z, L_z y S_z son magnitudes escalares,

$$J_z = L_z \pm S_z$$
$$m_j\hbar = m_l\hbar \pm m_s\hbar$$

y

7.25 $$m_j = m_l \pm m_s$$

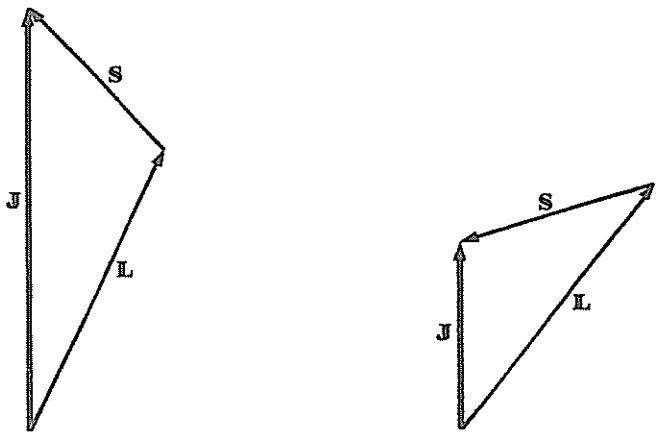
Los posibles valores de m_l varían desde $+l$ hasta $-l$, pasando por cero, y los de m_s son $\pm s$. El número cuántico l es siempre un número entero o cero, mientras que $s = \frac{1}{2}$, y como consecuencia, m_j debe ser semientero. Los posibles valores de m_j también varían desde $+j$ a $-j$ pasando por cero, en pasos enteros y así, para cualquier valor de l,

7.26 $$j = l \pm s$$

Lo mismo que m_j, j es siempre semientero.

Debido a la cuantización simultánea de **J**, **L** y **S**, sólo pueden existir ciertas orientaciones relativas determinadas. Esto es una conclusión general; en el caso de un átomo con un solo electrón, hay sólo dos orientaciones relativas posibles. Una de ellas corresponde a $j = l + s$, de manera que $J > L$, y la otra a $j = l - s$, de manera que $J < L$. La Fig. 7.8 muestra las dos maneras en que **L** y **S** se pueden combinar para formar **J** cuando $l = 1$. Evidentemente, los vectores de momentum angular orbital y de momentum angular de spin no pueden nunca ser exactamente paralelos o antiparalelos uno al otro o al vector momentum angular total.

Los momenta angulares **L** y **S** interactúan magnéticamente, como vimos en la Sec. 7-2 y como consecuencia se ejercen torcas entre sí. Si no hay ningún



$j = l + s = 3/2$ $\qquad$ $j = l - s = 1/2$

FIGURA 7-8 Las dos formas de sumar L y S para obtener J cuando $l = 1$, $s = \frac{1}{2}$.

campo magnético exterior, el momentum angular total J se conserva en magnitud y dirección, y el efecto de las torcas internas se manifiesta solamente por la precesión de **L** y **S** alrededor de la dirección de su resultante **J** (Fig. 7-9). Sin embargo, si existe un campo magnético exterior **B**, entonces **J** precesiona alrededor de la dirección de **B**, mientras que **L** y **S** continúan precesionando alrededor de **J**, como en la Fig. 7-10. La precesión de **J** alrededor de **B** da origen al anómalo efecto Zeeman, ya que orientaciones distintas de **J** implican energías ligeramente diferentes en presencia de **B**.

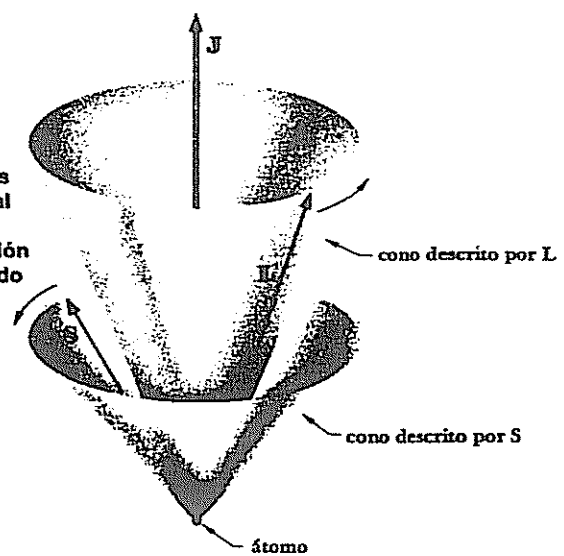


FIGURA 7-9 Los vectores momentum angular orbital y spin L y S verifican un movimiento de precesión alrededor de J, de acuerdo con el modelo vectorial del átomo.

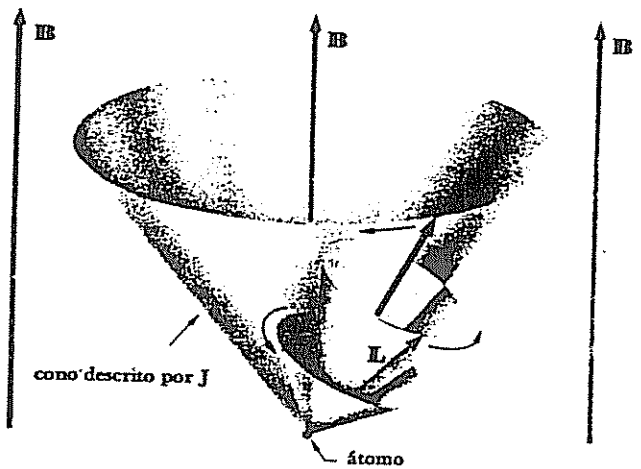


FIGURA 7-10 En presencia de un campo magnético externo B, el vector momentum angular total J verifica un movimiento de precesión alrededor de B de acuerdo con el modelo vectorial del átomo.

Los núcleos atómicos también tienen momenta angulares intrínsecos y momentos magnéticos, como veremos en el Cap. 11, que contribuyen a los momenta angulares totales del átomo y a los momentos magnéticos. Estas contribuciones son pequeñas debido a que los momentos magnéticos del núcleo son $\sim 10^{-3}$ veces la magnitud de los momentos de los electrones, lo que conduce a una *estructura hiperfina* de las líneas espectrales, con un espaciado típico entre sus componentes de $\sim 10^{-2}$ Å, mientras que una estructura fina típica tiene un espaciado de varios angstroms.

*7.8 EL ACOPLAMIENTO LS

Cuando más de un electrón aporta sus momenta angulares orbital y de spin al momentum angular total **J** de un átomo, **J** sigue siendo el vector suma de estos momenta individuales. Puesto que los electrones ejercen interacciones entre sí, la manera mediante la cual sus momenta individuales $\mathbf{L}_i$ y $\mathbf{S}_i$ se suman para formar **J** sigue ciertos modelos definidos que dependen de las circunstancias. El modelo normal para todos los átomos, excepto para los más pesados, es que los momenta angulares orbitales $\mathbf{L}_i$ de los diversos electrones están acoplados electrostáticamente en una sola resultante **L**, y los momenta angulares de spin $\mathbf{S}_i$ están acoplados independientemente en otra resultante única **S**; más adelante examinaremos las razones de este comportamiento, en esta misma sección. Los momenta **L** y **S** interactúan entonces magnéticamente por el efecto spin-órbita para formar un momentum angular total **J**. Este esquema, que se llama *acoplamiento LS*, se puede resumir de la siguiente manera

$$\mathbf{L} = \Sigma \mathbf{L}_i$$
$$\mathbf{S} = \Sigma \mathbf{S}_i \qquad (7.27)$$
$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

Acoplamiento LS

Como siempre, L, S, J, L_z S_z y J_z están cuantizados, donde sus números cuánticos respectivos son L, S, J, M_L, M_S y M_J. De aquí,

7.28 $$L = \sqrt{L(L+1)}\,\hbar$$

7.29 $$L_z = M_L\,\hbar$$

7.30 $$S = \sqrt{S(S+1)}\,\hbar$$

7.31 $$S_z = M_S\,\hbar$$

7.32 $$J = \sqrt{J(J+1)}\,\hbar$$

7.33 $$J_z = M_J\,\hbar$$

L y M_L son siempre números enteros o nulos, mientras que los otros números cuánticos son semienteros si el número de electrones que comprenden es impar, y enteros o nulos si el número de electrones es par.

Como ejemplo, consideremos dos electrones, uno con $l_1 = 1$ y el otro con $l_2 = 2$. Existen tres maneras de que $\mathbf{L}_1$ y $\mathbf{L}_2$ se puedan combinar en un solo vector $\mathbf{L}$ que esté cuantizado de acuerdo con la Ec. 7.28, como se muestra en la Fig. 7.11. Esto corresponde a L = 1, 2 y 3 ya que son posibles todos los valores de L, desde $l_1 + l_2$ hasta $l_1 - l_2$. El número cuántico de spin s es siempre $+\frac{1}{2}$, y así hay dos posibilidades para la suma $\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$, como se ve en la Fig. 7-11, que corresponde a S = 0 y a S = 1. Notemos que $\mathbf{L}_1$ y $\mathbf{L}_2$ no pueden ser nunca exactamente paralelos a $\mathbf{L}$ ni $\mathbf{S}_1$ y $\mathbf{S}_2$ a $\mathbf{S}$, excepto cuando el vector suma es cero. El número cuántico J puede tener todos los valores comprendidos entre L + S y L − S, que en este caso significa que J puede ser 0, 1, 2, 3, o bien, 4.

El esquema *LS* debe su existencia al valor relativo de las fuerzas electrostáticas que acoplan los momenta angulares orbitales individuales en una resultante $\mathbf{L}$, y los momenta angulares de spín individuales en una resultante $\mathbf{S}$. Los orígenes de estas fuerzas son interesantes. El acoplamiento entre los momenta angulares orbitales se puede comprender teniendo como referencia la Fig. 6-2, que muestra cómo varía en el espacio la densidad de probabilidad electrónica $|\psi|^2$ para diferentes estados cuánticos del átomo de hidrógeno. Los modelos correspondientes de electrones en átomos más complejos serán, por tanto, algo diferentes pero, en general, sigue siendo cierto que $|\psi|^2$ no es esféricamente simétrica, excepto para los estados s. (En este último caso, $l = 0$ y el electrón no tiene momentum angular orbital que pueda contribuir de algún modo.) Debido a las distribuciones asimétricas de sus densidades de carga, las fuerzas electrostáticas entre los electrones de un átomo varían con las orientaciones relativas de sus vectores de momenta angulares y sólo ciertas orientaciones relativas son estables. Estas configuraciones estables corresponden a un momentum angular orbital total que está cuantizado de acuerdo con la fórmula $L = \sqrt{L(L+1)}\,\hbar$.

El acoplamiento entre los diferentes $\mathbf{L}_i$ comúnmente es tal que la configuración de más baja energía es aquella para la cual L es máximo. Este efecto se entiende fácilmente si imaginamos a dos electrones en la misma órbita de Bohr. Como los electrones se repelen entre sí electrostáticamente, tienden a

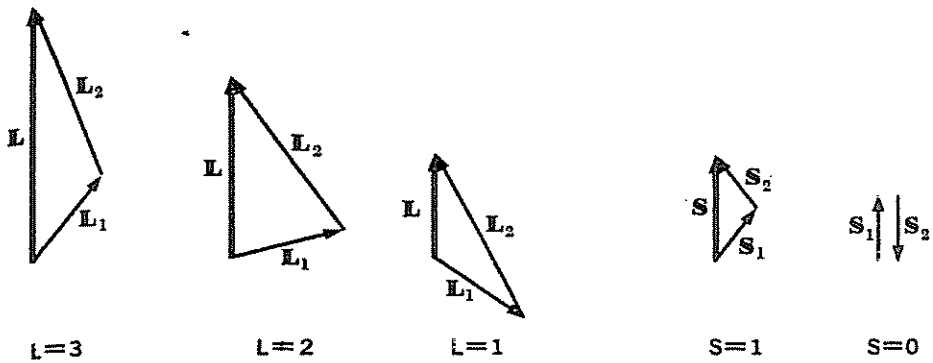


FIGURA 7-11 Cuando $l_1 = 1$, $s_1 = \frac{1}{2}$ y $l_2 = 2$, $s_2 = \frac{1}{2}$, hay tres formas de combinar L y L_2 para formar L y dos formas para que S_1 y S_2 den S.

girar alrededor del núcleo en la misma dirección, lo que lleva al máximo a L. Si giraran en direcciones opuestas para hacer mínimo a L, los electrones se rebasarían entre sí con mayor frecuencia y esto conduciría a una mayor energía del sistema.

El origen del fuerte acoplamiento entre los spines de los electrones es más difícil de ver porque es un efecto puramente mecano-cuántico, sin ninguna analogía clásica. (Se debe observar que la interacción directa entre los momentos magnéticos intrínsecos de los electrones es insignificante, y no es responsable del acoplamiento entre los momenta angulares de spín de los electrones.) La idea básica es que la función de onda completa $\psi(1, 2, \ldots, n)$ de un sistema de n electrones es el producto de una función de onda $u(1, 2, \ldots, n)$ que describe las coordenadas de los electrones y una función de spín $s(1,2,\ldots, n)$ que describe las orientaciones de sus spines. Como vimos en la Sec. 7-3, la función de onda completa $\psi(1, 2, \ldots, n)$ debe ser antisimétrica, lo que significa que $u(1, 2, \ldots, n)$ no es independiente de $s(1, 2, \ldots, n)$. Un cambio en las orientaciones relativas de los vectores de los momenta angulares de spín de los electrones debe ir acompañado, por tanto, de un cambio en las configuraciones electrónicas espaciales del átomo, lo que significa un cambio en la energía potencial electrostática del átomo. El pasar de un momentum angular de spín total S a otro diferente supone una alteración de la estructura del átomo y, por tanto, una gran fuerza electrostática, además de una alteración en las direcciones de los momenta angulares de spín $S_1, S_2, \ldots, S_n$, lo que solamente requiere una débil fuerza magnética. A esta situación es a la que nos referimos cuando decimos que los momenta de spín S_i están fuertemente acoplados electrostáticamente.

El S_i siempre se combina para dar una configuración de estado fundamental en el cual S es un máximo. Esto es un ejemplo de la regla de Hund; como se mencionó anteriormente, los electrones con spines paralelos tienen valores de m_l diferentes y se describen mediante funciones de onda

www.elsolucionario.org

diferentes, lo que significa que hay una separación promedio en espacio mayor entre los electrones y, consecuentemente, una energía total menor.

Aunque no trataremos de justificar esta conclusión, la combinación de **L** y **S** que hace que J sea *mínimo* da lugar a la energía más baja.

*7.9 EL ACOPLAMIENTO jj

Las fuerzas electrostáticas que acoplan a los vectores $\mathbf{L}_i$ en un solo vector **L** y a los $\mathbf{S}_i$ en otro vector **S**, son más fuertes que las fuerzas magnéticas spin-órbita que acoplan a **L** y a **S** para formar a **J** en los átomos ligeros, y dominan la situación aun cuando se aplique un campo magnético externo moderado. (En el último caso, la precesión de **J** alrededor de **B** es, por tanto, más lenta que la precesión de **L** y **S** alrededor de **J**.) Sin embargo, en los átomos pesados, la carga nuclear llega a ser lo suficientemente grande como para producir interacciones spin-órbita comparables en magnitud a las interacciones electrostáticas entre los $\mathbf{L}_i$ y los $\mathbf{S}_i$, lo que hace que empiece a fallar el esquema de acoplamiento *LS*. Una falla similar ocurre en campos magnéticos exteriores intensos (típicamente ~10 T), que produce el efecto Paschen-Back en los espectros atómicos. En el momento de la falla del acoplamiento *LS*, los momenta angulares totales $\mathbf{J}_i$ de los electrones individulaes se suman directamente para formar el momentum angular **J** del átomo completo, situación referida como *coplamiento jj*, ya que cada $\mathbf{J}_i$ está definido por un número cuántico j, como vimos en la sección anterior. Por tanto,

$$\mathbf{J}_i = \mathbf{L}_i + \mathbf{S}_i \qquad \mathbf{J} = \Sigma \mathbf{J}_i \qquad \text{Acoplamiento jj} \tag{7.34}$$

En la Sec. 6.4 vimos que a los estados de los momenta angulares orbitales individuales se les acostumbra representar mediante una letra minúscula, s para $l = 0$, p para $l = 1$, d para $l = 2$, etc. Un esquema semejante, pero con letras mayúsculas, se emplea para representar el estado electrónico completo de un átomo, de acuerdo con el número cuántico L del momentum angular orbital como sigue

L =	0	1	2	3	4	5	6...
	S	*P*	*D*	*F*	*G*	*H*	*I*...

Un superíndice delante de la letra (por ejemplo, ^2P) indica la *multiplicidad* del estado, o sea, el número de las diferentes orientaciones posibles de **L** y **S** y, por tanto, el número de los diferentes valores posibles de J. Esta multiplicidad es igual a $2S + 1$ en el caso normal en que $L > S$, ya que J varía desde $L + S$ hasta $L - S$, pasando por 0. Así, cuando $S = 0$, la multiplicidad es 1 (un estado *singulete*) y $J = L$; cuando $S = \frac{1}{2}$, la multiplicidad es 2 (un estado *doblete*) y $J = L \pm \frac{1}{2}$; cuando $S = 1$, la multiplicidad es 3 (un estado *triplete*) y $J = L + 1, L,$ o $L - 1$; etc. (En una configuración en la que $S > L$, la multiplicidad viene dada por $2L + 1$.) El número cuántico J, momentum angular total, se usa como un subíndice detrás de la letra, de manera que un estado $^2P_{3/2}$ (se lee como "doblete P tres medios") se refiere a una configuración electrónica en la que $S = \frac{1}{2}$, $L = 1$ y $J = \frac{3}{2}$. Por razones históricas, estas designaciones reciben el nombre de *símbolos de los términos*.

En el caso en que el momentum angular del átomo proceda de un solo electrón externo, el número cuantico total n de este electrón se puede usar como un prefijo: así, el estado fundamental del átomo de sodio se representa por $3^2S_{1/2}$, ya que su configuración electrónica tiene un electrón con $n = 3$, $l = 0$ y $s = \frac{1}{2}$ (así que $j = \frac{1}{2}$) fuera de las capas completas $n = 1$ y $n = 2$. Por conveniencia se acostumbra representar el estado anterior como $3^2S_{1/2}$ donde el superíndice 2 indica un doblete, aun cuando existe solamente una posibilidad única para J ya que $L = 0$.

*7.10 ESPECTROS DE UN ELECTRON

Estamos ahora en posición de comprender los caracteres principales de los espectros de los diversos elementos. Antes de examinar algunos ejemplos representativos, deberíamos mencionar que existen otras complicaciones que no se han considerado aquí, por ejemplo, aquellas que provienen de efectos relativistas y del acoplamiento entre electrones y fluctuaciones de vacío en el campo electromagnético (véase la Sec. 6.10). Estos factores adicionales descomponen ciertos estados de energía en subestados muy próximos y, por tanto, representan otras fuentes de estructura fina en las líneas espectrales.

La Fig. 7-12 muestra los diversos estados del átomo de hidrógeno, clasificados por su número cuántico total n y por su número cuántico de momentum angular orbital l. La regla de selección para las transiciones permitidas es aquí $\Delta l = \pm 1$, como se ve por las transiciones representadas. Para indicar algunos de los detalles que normalmente se omiten en un diagrama simple de esta clase, se han representado las estructuras detalladas de los niveles $n = 2$ y $n = 3$; no solamente tienen distinta energía todos los subestados con el mismo n y distinto j, sino también los estados del mismo n y j pero diferentes l. Este último efecto es mucho más marcado para los estados con n y l pequeños, y se estableció por primera vez en 1947 en el "desplazamiento de Lamb", del estado $2^2S_{1/2}$ al estado $2^2P_{1/2}$. Todas estas causas desdoblan la línea espectral H_α ($n = 3 \rightarrow n = 2$) en siete componentes muy juntas.

El átomo de sodio tiene un único electrón 3*s* fuera de las capas completas interiores, y así, si suponemos que sus 10 electrones neutralizan completamente la carga nuclear de $+10e$ en el interior del núcleo, el electrón exterior está influido por una carga nuclear efectiva de $+e$ lo mismo que el átomo de hidrógeno. Por esto podemos esperar, como primera aproximación, que los niveles de energía del sodio sean los mismos que los del átomo de hidrógeno,

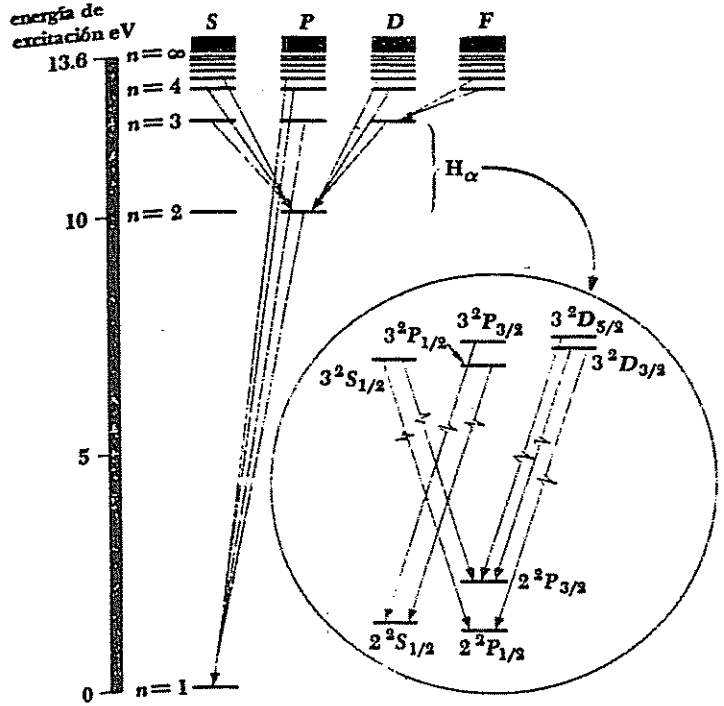


FIGURA 7-12 Diagrama de niveles de energía del hidrógeno que muestra los orígenes de algunas de las líneas espectrales más importantes. También se representan las estructuras detalladas de los niveles $n = 2$ y $n = 3$ y las transiciones que conducen a los distintos componentes de la línea.

excepto que el nivel más bajo corresponderá a $n = 3$ en lugar de $n = 1$ debido al principio de exclusión. La Fig. 7-13 es un diagrama de los niveles de energía del sodio, y comparándolo con los niveles del hidrógeno, que también se representan en la figura, vemos que existe concordancia para los estados con valores más altos de l, es decir, para los que tengan mayor momentum angular.

Para comprender la razón de las discrepancias en los valores más bajos de l, sólo necesitamos ver en la Fig. 6-11 cómo la probabilidad de encontrar un electrón en el átomo de hidrógeno varía con la distancia al núcleo. Cuanto más pequeño es el valor l para un n dado, más se acerca el electrón al núcleo. Aunque las funciones de onda del sodio no son idénticas a las del hidrógeno, en general su comportamiento es similar y, de acuerdo con lo que esperábamos, en el átomo de sodio el electrón atraviesa más frecuentemente las capas de electrones internos cuando está en un estado s, con menos frecuencia cuando está en un estado p, aun menos frecuentemente cuando está en un estado d, etc. Cuanto menos protegido está un electrón exterior de la carga total

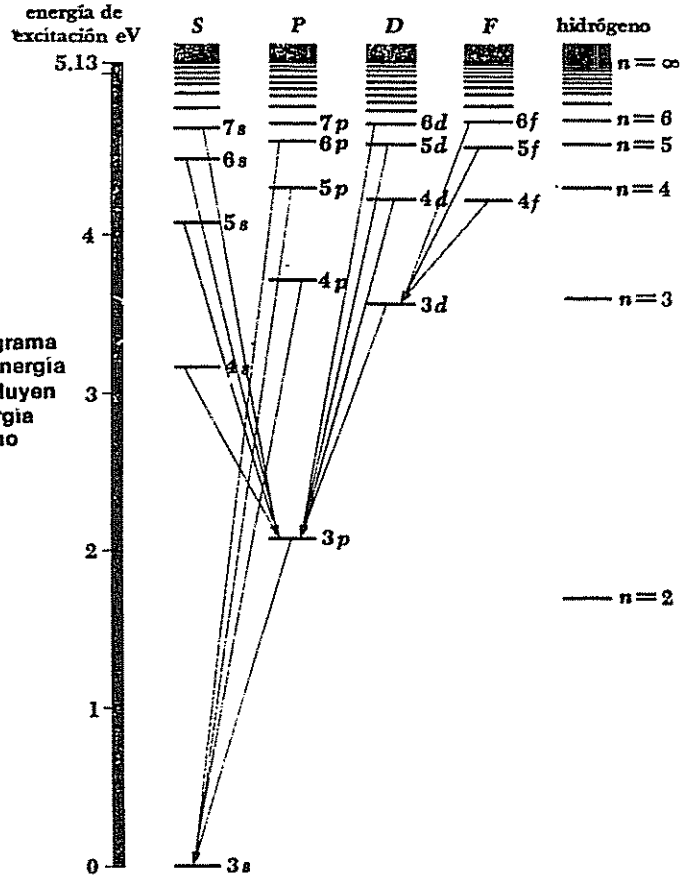


FIGURA 7-13 Diagrama de los niveles de energía del sodio. Se incluyen los niveles de energía del hidrógeno como comparación.

nuclear, tanto mayor es la fuerza media que actúa sobre él y tanto menor (esto es, tanto más negativa) es su energía total. Por esta razón, los estados con valores pequeños de l están, en el sodio, desplazados hacia abajo de sus equivalentes en el hidrógeno, como se ve en la Fig. 7-13, y hay pronunciadas diferencias de energía entre los estados del mismo n pero diferente l.

*7.11 ESPECTROS DE DOS ELECTRONES

En los átomos de hidrógeno y de sodio, un solo electrón es responsable de los niveles de energía. Sin embargo, hay dos electrones $1s$ en el estado fundamental del helio, y es interesante considerar el efecto del acoplamiento LS en las propiedades y en el comportamiento del átomo de helio. Para hacer esto, observemos primero las reglas de selección para las transiciones permitidas bajo el acoplamiento LS:

7.35 $\Delta L = 0, \pm 1$

7.36 $\Delta J = 0, \pm 1$

7.37 $\Delta S = 0$

Reglas de selección

Cuando sólo se considera a un electrón, entonces $\Delta L = 0$ está prohibido, y $\Delta L = \Delta l = \pm 1$ es la única posibilidad. Además, J debe cambiar cuando el estado inicial tiene $J = 0$, de manera que $J = 0 \rightarrow J = 0$ está prohibido.

En la Fig. 7-14 se representa el diagrama de los niveles de energía del helio. Los diversos niveles presentan configuraciones en las que un electrón se encuentra en su estado fundamental y el otro en un estado excitado, pero a causa de que los momenta angulares de los dos electrones están acoplados, es apropiado considerar los niveles como característicos del átomo entero. Hay tres diferencias notorias entre este diagrama y los correspondientes al hidrógeno y al sodio.

Primero, existe la división en estados singulares y tripletes, que son, respectivamente, estados en los que los spines de los dos electrones son antiparalelos (para dar $S = 0$) y paralelos (para dar $S = 1$). A causa de la regla de selección $\Delta S = 0$, ninguna de las transiciones permitidas puede tener lugar entre los estados singuletes y los tripletes, y el espectro del helio proviene de transiciones en una serie o en otra. Los átomos de helio en estados singuletes (spines antiparalelos) constituyen el *parahelio*, y aquellos otros en estados tripletes (spines paralelos) constituyen el *ortohelio*. Un átomo de ortohelio puede perder energía de excitación en un choque y llegar a convertirse en un átomo de parahelio, mientras que un átomo de parahelio puede ganar energía de excitación en un choque y convertirse en uno de ortohelio; normalmente el helio líquido o gaseoso es, por tanto, una mezcla de ambos. Los estados tripletes más bajos se llaman *metastables* porque, en ausencia de choques, un átomo en uno de ellos puede retener su energía de excitación durante un tiempo relativamente grande (un segundo o más) antes de irradiarla.

La segunda particularidad notoria en la Fig. 7-14 es la ausencia del estado 1^3S. El estado triplete más bajo es el 2^3S, aunque el estado singulete más bajo es el 1^1S. El estado 1^3S se pierde como consecuencia del principio de exclusión, ya que en este estado los dos electrones tendrán spines paralelos y, por tanto, idénticos números cuánticos. Tercero, la diferencia de energía entre el estado fundamental y el estado excitado más bajo es relativamente grande, lo cual refleja la compacta unión de los electrones de la capa completa, estudiada anteriormente en este capítulo. La energía de ionización del helio (el trabajo que se debe suministrar para separar un electrón del átomo de helio) es de 24.6 eV, el más alto de todos los elementos.

El último diagrama de niveles de energía que consideramos es el del mercurio, que tiene dos electrones exteriores a un núcleo de 78 electrones en capas o subcapas completas (Tabla 7-2). Cabe esperar una división entre

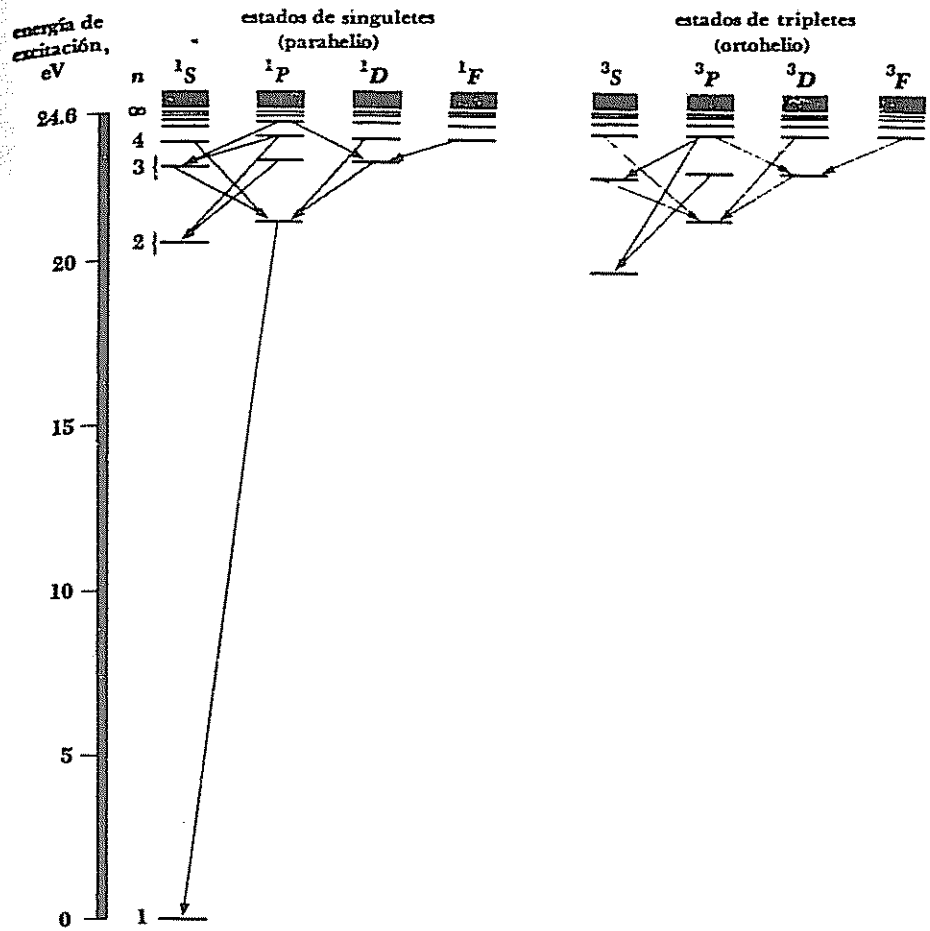
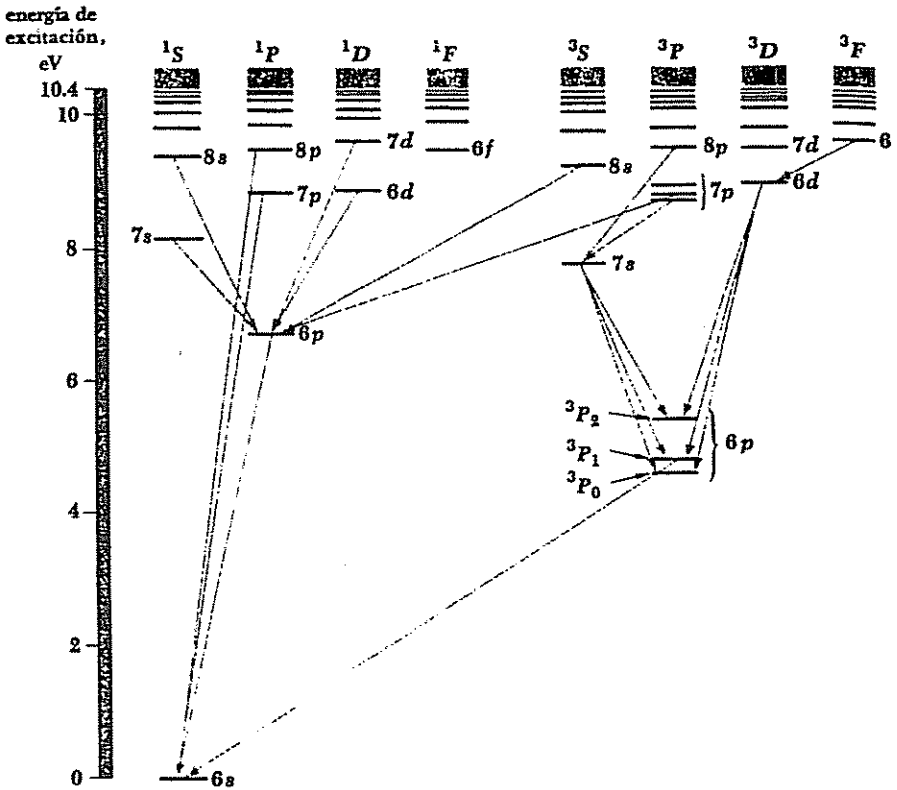


FIGURA 7-14 Diagrama de los niveles de energía del helio, que muestra la división en los estados singuletes (parahelio) y tripletes (hortohelio). No existe el estado 1^3S.

estados singuletes y tripletes, como en el helio, pero debido a que el átomo es tan pesado, también podemos esperar signos de una falla en el acoplamiento *LS* de los momenta angulares. Como se indica en la Fig. 7-15, ambas cosas se cumplen y varias de las líneas prominentes en el espectro del mercurio proceden de transiciones que violan la regla de selección $\Delta S = 0$. Un ejemplo es la transición $^3P_1 \rightarrow {}^1S_0$, que produce una intensa línea a 2,537-Å en el ultravioleta. A decir verdad, esto no significa que la probabilidad de transición sea necesariamente muy alta, ya que los tres estados $^3P_1$ son los más bajos de la serie triplete, y, por tanto, tienden a estar altamente poblados en el vapor de

www.elsolucionario.org

FIGURA 7-15 Diagrama de los niveles de energía del mercurio. En cada nivel excitado, un electrón está en el estado base y la designación de los niveles en el diagrama corresponde al estado del otro electrón.



mercurio excitado. Las transiciones $^3P_0 \nrightarrow {}^1S_0$ y $^3P_2 \nrightarrow {}^1S_0$ violan respectivamente las reglas que prohíben transiciones desde $J = 0$ a $J = 0$ y que limitan ΔJ a 0 o ± 1, así como violan $\Delta S = 0$, y por tanto, son considerablemente menos probables que la transición $^3P_1 \rightarrow {}^1S_0$. Los estados $^3P_0$ y $^3P_2$ son así metastables y, en ausencias de choques, un átomo puede permanecer en uno de ellos durante un tiempo relativamente grande. La fuerte interacción spin órbita en el átomo de mercurio que conduce a una falla parcial del acoplamiento *LS*, es también responsable del amplio espaciado de los elementos de los tripletes ^3P.

7.12 LOS ESPECTROS DE RAYOS X

En el Cap. 2 vimos que el espectro de rayos X de los anticátodos bombardeados por electrones rápidos presenta picos estrechos de longitudes de onda característicos del material del anticátodo, además de una distribución

continua de longitudes de onda que descienden hasta un valor mínimo, inversamente proporcional a la energía de los electrones. El espectro continuo de rayos X es el resultado de un fenómeno inverso al efecto fotoeléctrico, en el que la energía cinética del electrón se transforma en un fotón, con una energía $h\nu$. Por otra parte, el espectro discreto tiene su origen en las transiciones de los electrones dentro de los átomos que han sido perturbados por los electrones incidentes.

Las transiciones relacionadas con los electrones exteriores de un átomo proporcionan normalmente una energía de pocos eV, y aun la separación del electrón exterior requiere, cuando mucho, 24.6 eV (para el helio). Estas transiciones están asociadas con fotones cuyas longitudes de onda están comprendidas cerca de la parte visible del espectro electromagnético. Los electrones interiores de los elementos más pesados son una cuestión bastante diferente, porque estos electrones sienten toda la carga nuclear completa casi sin blindaje y, en consecuencia, están fuertemente unidos. En el sodio, por ejemplo, para separar el electrón externo 3*s*, sólo se necesitan 5.13 eV, mientras que para los electrones interiores se necesitan 31 eV para cada electrón 2*p*, 63 eV para cada electrón 2*s* y 1041 eV para cada electrón 1*s*. En un átomo, las transiciones de los electrones internos son los que dan lugar a los espectros de rayos X discretos, debido a las altas energías de los fotones correspondientes.

La Fig. 7-16 muestra los niveles de energía (no a escala) de un átomo pesado, ordenados de acuerdo con el número cuántico total *n*; las diferencias de energía entre estados de momentum angular dentro de una capa son menores, comparados con las diferencias de energía entre capas. Consideremos lo que ocurre cuando un electrón energético choca con un átomo y desprende uno de los electrones de la capa *K*. (El electrón de la capa *K* podría también elevarse a uno de los estados cuánticos superiores incompletos del átomo, pero la diferencia entre las energías necesarias para hacerlo y para separar completamente al electrón es insignificante, solamente el 0.2% en el átomo de sodio, y menos aún en los átomos más pesados.) Un átomo que pierde un electrón K, cede la mayoría de su considerable energía de excitación en forma de un fotón de rayos X cuando un electrón cae en el hueco de la capa K desde la capa externa. Como se indica en la Fig. 7-16, las series de líneas *K* en el espectro de rayos X de un elemento consiste en longitudes de onda producidas en las transiciones desde los niveles *L*, *M*, *N*... al nivel *K*. Del mismo modo, las series *L* de mayor longitud de onda se originan cuando un electrón *L* es arrancado del átomo, la serie *M* cuando es arrancado un electrón *M*, etc. Los dos picos del espectro de rayos X del molibdeno (Fig. 2-4) son las líneas K_α y K_β de la serie *K*.

Un átomo que ha perdido un electrón interno puede también perder energía de excitación por el *efecto Auger* sin que haya emisión de un fotón de

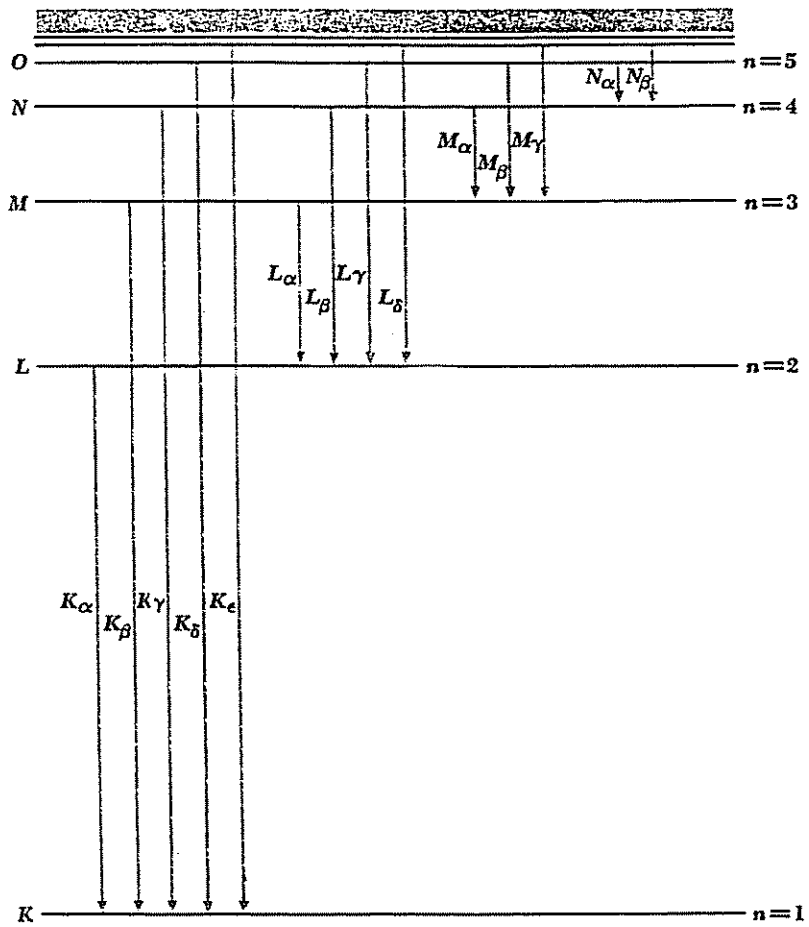


FIGURA 7-16 El Origen del espectro de rayos X.

rayos X. En el efecto Auger, un electrón de la capa externa es arrancado del átomo al mismo tiempo que otro electrón de la misma capa cae a una interior incompleta; el electrón arrancado se lleva la energía de excitación del átomo en lugar de hacerlo un fotón. En cierto sentido, el efecto Auger representa un efecto fotoeléctrico interno, aunque el fotón nunca llega a estar realmente dentro del átomo. El proceso Auger compite con la emisión de rayos X en la mayoría de los átomos, pero los electrones resultantes normalmente son absorbidos en el anticátodo, mientras que los rayos X emergen fácilmente y pueden ser detectados.

PROBLEMAS

1 Si los átomos pudieran contener electrones con número cuántico principal hasta $n = 6$, ¿Cúantos elementos habría?

2. Las energías de ionización de los elementos de número atómico 20 a 29 son muy aproximadas. ¿Por qué es esto así cuando existen variaciones considerables en las energías de ionización de otras secuencias consecutivas de elementos?

3. El radio atómico de un elemento se puede determinar por medio de mediciones efectuadas sobre cristales de los cuales es componente. Los resultados se indican en la Fig. 10-3. Explicar la dirección general de la variación del radio con el número atómico.

4. Hace muchos años se señaló que los números atómicos de los gases raros se obtenían mediante las fórmulas:

$$\begin{aligned}
Z(\text{He}) &= 2(1^2) = 2 \\
Z(\text{Ne}) &= 2(1^2 + 2^2) = 10 \\
Z(\text{Ar}) &= 2(1^2 + 2^2 + 2^2) = 18 \\
Z(\text{Kr}) &= 2(1^2 + 2^2 + 2^2 + 3^2) = 36 \\
Z(\text{Xe}) &= 2(1^2 + 2^2 + 2^2 + 3^2 + 3^2) = 54 \\
Z(\text{Rn}) &= 2(1^2 + 2^2 + 2^2 + 3^2 + 3^2 + 4^2) = 86
\end{aligned}$$

Explicar el origen de este esquema en función de la teoría del átomo.

5. Un haz de electrones entra en un campo magnético uniforme de densidad de flujo de 1.2 T. Hallar la diferencia de energía entre los electrones cuyos spines son paralelos y antiparalelos al campo.

6. ¿Por qué tiende a confirmar la existencia de electrones como entidades independientes dentro del átomo, la concordancia entre las observaciones del efecto Zeeman normal y la teoría de este efecto?

7. Una muestra de cierto elemento se coloca en un campo magnético de densidad de flujo 0.3 T. ¿A qué distancia están los componentes Zeeman de una línea espectral de 4,500 Å de longitud de onda?

8. ¿Por qué el efecto Zeeman normal sólo aparece en átomos con un número par de electrones?

9. Encontrar los valores S, L y J que corresponden a cada uno de los siguientes estados: $^1S_0$, $^3P_2$, $^2D_{3/2}$, $^5F_5$, $^6H_{5/2}$.

10. El átomo de carbono tiene dos electrones $2s$ y dos electrones $2p$ por fuera de una capa interior completa. Su estado fundamental es $^3P_0$. ¿Cuáles son los símbolos de los términos de los demás estados permitidos, en caso de que los haya? ¿Por qué podemos pensar que el estado $^3P_0$ es el estado fundamental?

11. El átomo de litio tiene un electrón $2s$ fuera de una capa interior completa. Su estado base es $^2S_{1/2}$. ¿Cuáles son los símbolos de los términos de los demás estados permitidos en caso de que los haya? ¿Por qué podemos pensar que el estado $^2S_{1/2}$ es el estado fundamental?

12. El átomo de magnesio tiene dos electrones $3s$ fuera de capas internas completas. Encontrar el símbolo de su estado fundamental.

13. El átomo de aluminio tiene dos electrones $3s$ y un electrón $3p$ por fuera de capas internas completas. Hallar el símbolo de su estado fundamental.

14. El momento magnético μ_J de un átomo, en el que hay acoplamiento LS, tiene una magnitud

$$\mu_J = \sqrt{J(J+1)}\, g_J \mu_B$$

donde $\mu_B = e\hbar/2m$ es el magnetón de Bohr y

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}$$

es el *factor g de Landé* *a*) Derivar este resultado con la ayuda de la ley de los cosenos, partiendo del hecho de que, promediando con el tiempo, sólo las componentes de μ_L y μ_S paralelas a J contribuyen a μ_J. *b*) Considerar un átomo que obedece al acoplamiento LS que está en un campo magnético débil, B, en el que el acoplamiento se conserva. ¿Cuántos subestados hay para un valor dado de J? ¿Cuál es la diferencia de energía entre los diferentes subestados?

15. El estado fundamental del cloro es $^2P_{3/2}$. Hallar su momento magnético (ver el problema anterior). ¿En cuántos subestados se desdobla el estado base en un campo magnético débil?

16. Demostrar que si el ángulo entre las direcciones de L y S de la Fig. 7-8 es θ,

$$\cos\theta = \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2\sqrt{l(l+1)s(s+1)}}$$

17. El efecto spin-órbita separa las transiciones $3P \rightarrow 3S$ en el átomo de sodio (que da lugar a la luz amarilla de las lámparas de vapores de sodio que se utilizan en las carreteras) en dos líneas, de 5,890 Å que corresponde a $3P_{3/2} \rightarrow 3S_{1/2}$ y de 5,896 Å que corresponde a $3P_{1/2} \rightarrow 3S_{1/2}$. Usar estas longitudes de onda para calcular la inducción magnética efectiva que experimenta el electrón exterior en el átomo de sodio como resultado de su movimiento orbital.

18. Demostrar que la frecuencia de la línea K_α de rayos X de un elemento de número atómico Z está dada por

$$\nu = \frac{3cR(Z-1)^2}{4}$$

donde R es la constante de Rydberg. Considerar que cada electrón L en un átomo puede compararse con el único electrón de un átomo de hidrógeno cuya carga nuclear efectiva se reduce por la presencia de cualquier electrón K. La proporcionalidad entre ν y (Z-1) la utilizó Moseley en 1913 para establecer los números atómicos de los elementos a partir de sus espectros de rayos X. Esta proporcionalidad se conoce como *ley de Moseley*.

19. ¿Qué elemento tiene una línea K_α de rayos X de longitud de onda 1.785 Å? ¿De longitud de onda 0.712 Å?

20. Explicar por qué los espectros de rayos X de elementos de números atómicos próximos son cualitativamente muy semejantes, mientras que los espectros ópticos de estos elementos pueden ser considerablemente diferentes.

www.elsolucionario.org

FISICA DE LAS MOLECULAS 8

¿Cuál es la naturaleza de las fuerzas que unen a los átomos entre sí para formar las moléculas? Este problema, de capital importancia tanto para el químico como para el físico, necesita una respuesta satisfactoria para poder sustentar la teoría del átomo. La facultad de la teoría cuántica del átomo, no sólo para explicar el enlace químico sino también para hacerlo en función de un efecto que no tiene analogía en la física clásica, es un testimonio más de la fuerza de esta teoría.

8.1 FORMACION MOLECULAR

Una molécula es la unión estable de dos o más átomos. "Estable" significa que para que una molécula se desdoble en sus átomos constituyentes se le debe suministrar energía de una fuente exterior. En otras palabras, una molécula existe porque la energía del sistema unido es menor que la del sistema de átomos separados. Si las interacciones entre un determinado grupo de átomos reducen su energía total, se puede formar una molécula; si las interacciones aumentan su energía total, los átomos se repelen entre sí.

Consideremos lo que ocurre cuando dos átomos se van aproximando. Pueden ocurrir tres situaciones extremas:

1. Se forma un *enlace covalente*. Los dos átomos comparten uno o más pares de electrones. A medida que estos electrones circulan entre los átomos, tardan más tiempo entre los átomos que en otra parte, lo que produce una fuerza de atracción. Un ejemplo de esto es la molécula de hidrógeno H_2, cuyos electrones pertenecen al mismo tiempo a los dos protones (Fig. 8-1*a*).

2. Se forma un *enlace iónico*. Uno o más electrones se pueden transferir de

un átomo al otro, y los iones negativos y positivos resultantes se atraen entre sí. Un ejemplo es el NaCL, donde el enlace existe entre los iones Na^+ y Cl^- y no entre átomos Na y CL (Fig. 8-1*b*).

3. No se forma enlace. Cuando las estructuras electrónicas de dos átomos se superponen, se forma un sistema único y, de acuerdo con el principio de exclusión, dos electrones en este tipo de sistemas no pueden existir en el mismo estado cuántico. Si algunos de los electrones en interacción se fuerzan hacia niveles de energía más altos de los que ocupaban en los átomos separados, el sistema puede alcanzar mayor energía y resultar inestable. Para imaginar este efecto, podemos considerar que los electrones escapan unos de otros tanto como les es posible para evitar formar un sistema único, lo que conduce a una fuerza de repulsión entre los núcleos. (Aun cuando se puede obedecer el principio de exclusión sin que haya incremento de energía, habrá una fuerza electrostática de repulsión entre los diferentes electrones; sin embargo, este es un factor mucho menos significativo que el principio de exclusión en la formación de enlaces.)

Comúnmente los enlaces iónicos no dan lugar a formación de moléculas. Una molécula es un agregado de átomos eléctricamente neutro que se mantiene unido con la fuerza suficiente para que resulte experimentalmente observable como una partícula. Así, las unidades individuales que constituyen el hidrógeno gaseoso constan cada una de dos átomos de

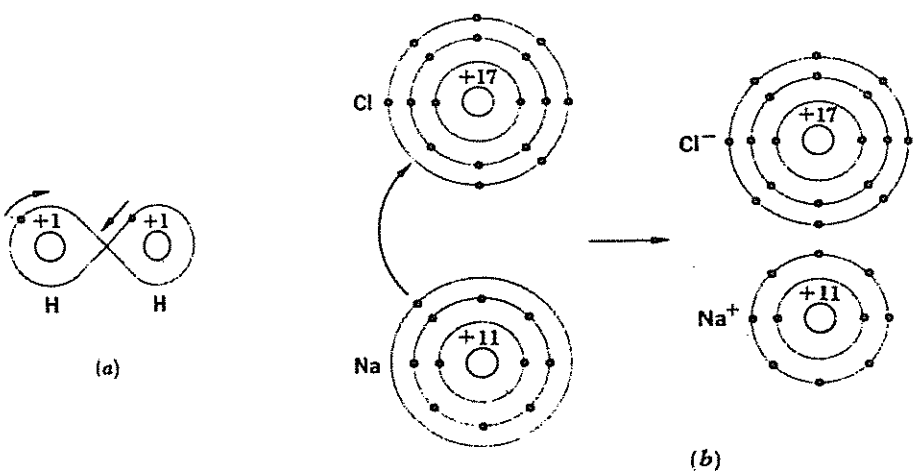


FIGURA 8.1 a) Enlace covalente. Los electrones compartidos pasan, en promedio, más tiempo entre sus núcleos parentales y, por tanto, dan lugar a una fuerza de atracción. *b*) Enlace iónico. El sodio y el cloro se combinan químicamente por transferencia de electrones, desde los átomos de sodio hacia los átomos de cloro; los iones resultantes se atraen electrostáticamente.

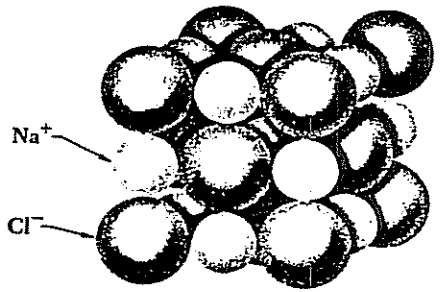


FIGURA 8.2 Modelo a escala de un cristal de NaCl.

hidrógeno, por lo que podemos considerarlas como moléculas. Por otra parte, los cristales de sal común (NaCl) son agregados de iones cloro y sodio que, aunque dispuestos invariablemente en una estructura definida determinada (Fig. 8-2), no se aparean en moléculas separadas que constan de un ion Na^+ y un ion Cl^-; de hecho, los cristales de sal común pueden tener casi todos los tamaños. Siempre hay el mismo número de iones Na^+ y Cl^-, de manera que la fórmula NaCl representa correctamente su composición. Sin embargo, estos iones forman moléculas en vez de cristales únicamente en el estado gaseoso.

El enlace en H_2 es puramente covalente y en el NaCl es puramente iónico, pero en muchas otras moléculas se presenta un tipo intermedio de enlace en el que los átomos comparten electrones en grado desigual. Un ejemplo de ello es la molécula de HCl, donde el átomo de Cl atrae a los electrones compartidos con mayor fuerza que el átomo H. Se puede argumentar que el enlace iónico no es otra cosa que el caso extremo del enlace covalente.

8.2 ELECTRONES COMPARTIDOS

El sistema molecular más sencillo posible es el H_2^+ que es la molécula ionizada de hidrógeno, en la que un solo electrón une a dos protones. Antes de considerar detalladamente el enlace en H_2^+, examinemos de manera general cómo es posible que dos protones compartan un electrón y por qué ese hecho conduce a una disminución de la energía total y, por tanto, a un sistema estable.

En el Cap. 5 estudiamos el fenómeno de penetración de barrera mecánico-cuántico: una partícula puede "escapar" de una caja aun cuando no tenga la energía suficiente para atravesar la pared, ya que la función de onda de la partícula se extiende más allá de ella. Solamente cuando la pared es infinitamente fuerte, la función de onda está enteramente dentro de la caja. El campo eléctrico en torno a un protón es, en efecto, una caja para un electrón, y dos protones adyacentes corresponden a un par de cajas separadas por una pared (Fig. 8-3). No existe un mecanismo en la física clásica por medio del cual

el electrón de un átomo de hidrógeno pueda ser transferido espontáneamente a un protón vecino más distante que el protón padre. Sin embargo, en la física cuántica existe dicho mecanismo. Hay cierta probabilidad de que un electrón encerrado en una caja haga un túnel a través de la pared y pase a la otra caja, y una vez ahí tiene la misma probabilidad de regresar a la primera. Se puede describir esta situación diciendo que el electrón es compartido por los protones.

Para que quede claro: la probabilidad de que un electrón atraviese la región de alta energía potencial —la "pared"— entre los dos protones depende mucho de la distancia que los separe. Si la distancia protón-protón es 1 Å, se puede considerar que el electrón va de un protón al otro cada 10^{-15} s, lo que significa que podemos considerar legítimamente que el electrón es compartido por ambos. Sin embargo, si la distancia protón-protón es 10 Å, el electrón cruza en promedio, una vez por segundo, lo que en escala atómica representa

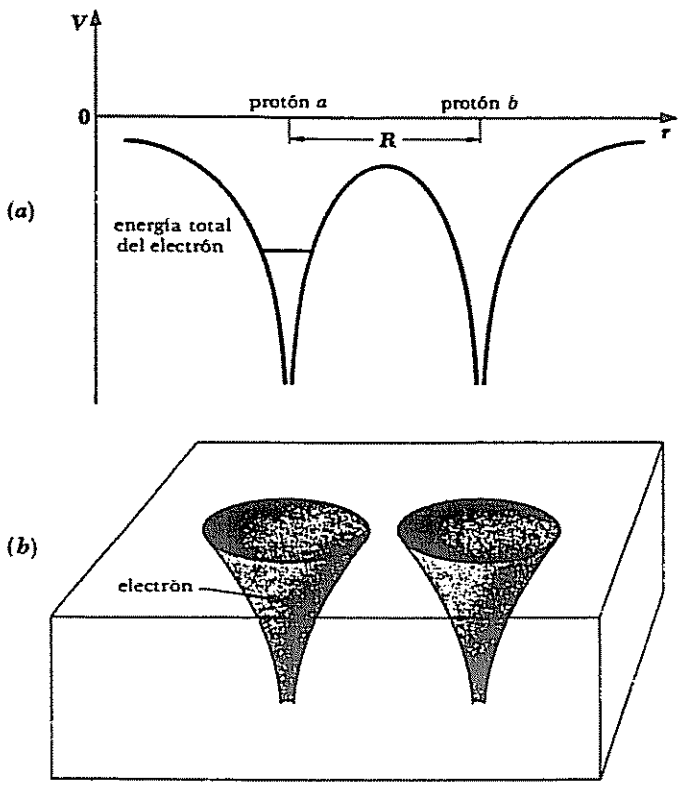


FIGURA 8.3 *a)* Energía potencial de un electrón en el campo electrónico de dos protones cercanos. Se indica la energía potencial de un electrón en estado base. *b)* Dos protones cercanos corresponden, de acuerdo con la mecánica cuántica, a un par de cajas separadas por una pared.

un tiempo infinito. Como el radio efectivo de la función de onda 1*s* en el hidrógeno es 0.53 Å, concluimos que el compartir electrones puede tener lugar únicamente entre átomos cuyas funciones se superpongan en forma considerable.

Dado que dos protones pueden compartir un electrón, existe un argumento sencillo que demuestra por qué la energía de este tipo de sistemas puede ser menor que la de un átomo de hidrógeno y un protón por separado. Según el principio de incertidumbre, cuanto menor sea la región a la cual se restrinja una partícula, mayor será su momentum y, por tanto, su energía cinética. Un electrón compartido por dos protones está menos confinado que uno que pertenezca a un solo protón, y esto significa que tiene menos energía cinética. La energía total del electrón en H_2^+ es así menor que la del electrón en $H + H^+$, y con tal que la magnitud de la repulsión protón-protón en H_2^+ no sea demasiado grande, H_2^+ debe ser estable.

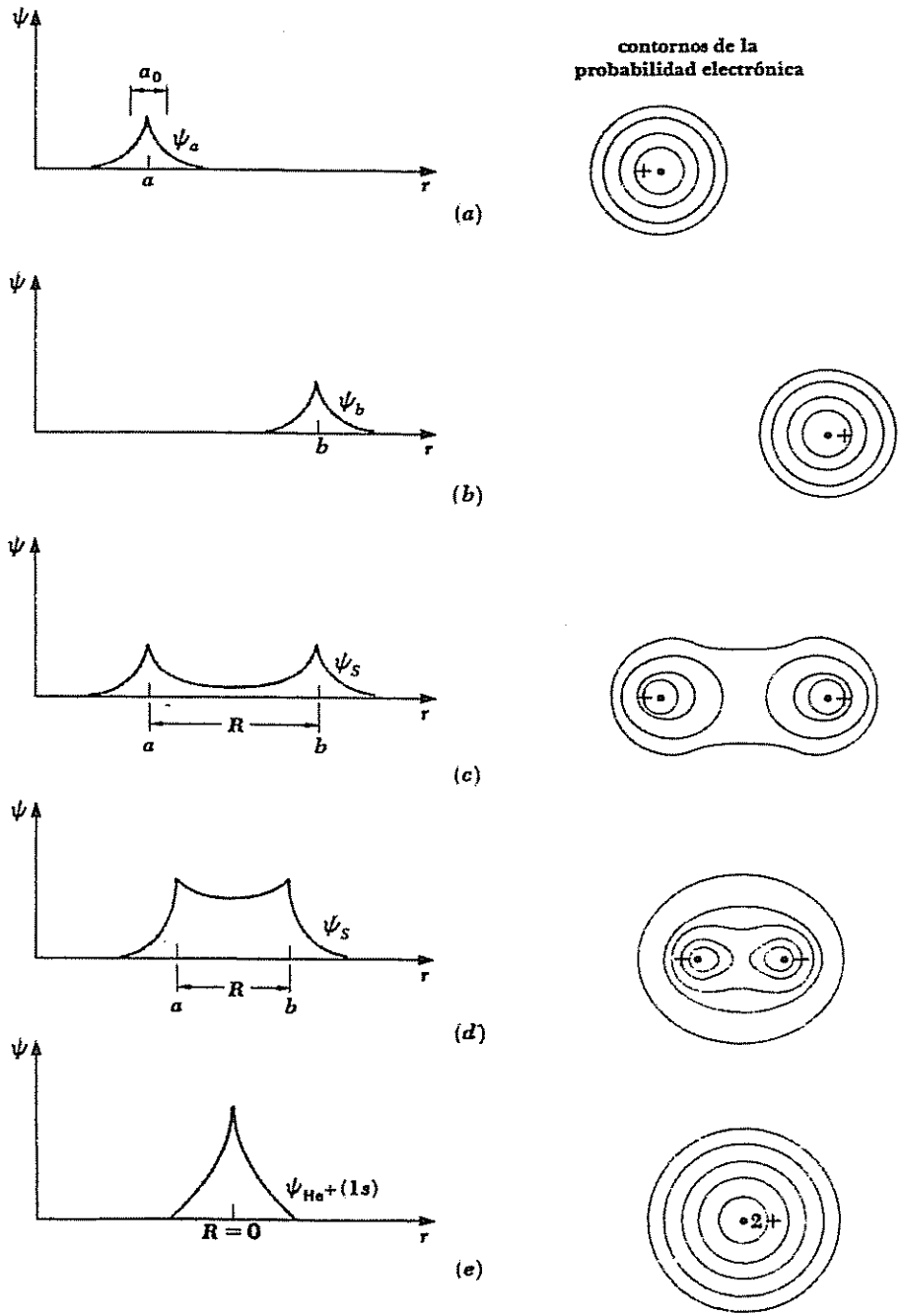
Los argumentos precedentes son del tipo mecánico-cuántico, mientras que normalmente tendemos a considerar las interacciones entre partículas cargadas en función de fuerzas electrostáticas. Existe un teorema muy importante, demostrado independientemente por Feynman y Hellmann, y que lleva su nombre, que establece en esencia que ambos métodos conducen a idénticos resultados. De acuerdo con el teorema de Feynman-Hellmann, si se conoce la probabilidad de distribución del electrón en una molécula, se puede usar un método clásico para calcular la energía del sistema y llegar a las mismas conclusiones que por un procedimiento puramente mecánico-cuántico. El teorema de Feynman-Hellmann no es un teorema evidente, ya que al tratar a una molécula en función de fuerzas electrostáticas no toma en cuenta explícitamente la energía cinética del electrón, mientras que un procedimiento cuántico considera a la energía total del electrón; no obstante, una vez determinada la función de onda ψ del electrón, se puede usar cualquiera de los dos métodos.

8.3 EL ION MOLECULAR H_2^+

Lo que desearíamos conocer es la función de onda ψ del electrón en H_2^+, ya que a partir de ψ, podemos calcular la energía del sistema en función de la separación R de los protones. Si $E(R)$ tiene un mínimo, sabremos que puede existir un enlace y también podremos determinar la energía de enlace y separación de equilibrio entre protones.

En lugar de resolver la ecuación de Schrödinger para ψ que es un procedimiento largo y complicado, utilizaremos un método intuitivo. Empecemos por tratar de suponer qué es ψ cuando R, la distancia entre los protones, es grande comparada con a_0, el radio de la órbita de Bohr más pequeña en el átomo de hidrógeno. En esta circunstancia, ψ cerca de cada protón se debe parecer mucho a la función de onda 1*s* del átomo de hidrógeno, como se representa en la Fig. 8-4, donde la función de onda 1*s* relativa al

www.elsolucionario.org



FIGURAS 8.4 Combinación de dos funciones de onda $1s$ del átomo de hidrógeno para formar la función de onda ψ_s simétrica de H_2^+.

protón a se llama ψ_a y la relativa al protón b recibe el nombre de ψ_b.

También sabemos cuál es la apariencia de ψ cuando R es 0, es decir, cuando imaginamos que los protones se funden en uno solo. Aquí la situación es la del ion He^+, puesto que el electrón está ahora en presencia de un núcleo único cuya carga es $+2e$. La función de onda $1s$ de He^+ es de la misma forma que la de H, pero tiene mayor amplitud en el origen (Fig. 8-4*e*). Evidentemente, ψ va a ser algo parecida a la función de onda esquematizada en la Fig. 8-4*d*, donde R es comparable a a_0. La probabilidad de encontrar al electrón en la región entre protones, probabilidad de la que hemos hablado cuando tratamos de electrones compartidos por protones, se ve aumentada. Por tanto, en promedio, se produce un exceso de carga negativa entre protones, lo que hace que se atraigan entre sí. Tenemos que establecer ahora si la magnitud de esta atracción es suficiente para vencer la repulsión mutua de los protones.

La combinación de ψ_a y ψ_b en la Fig. 8-4 es simétrica, ya que el cambio de a y b no afecta a ψ (ver Sec. 7.3). Sin embargo, también se puede concebir una combinación *antisimétrica* de ψ_a y ψ_b,(Fig. 8-5). Aquí hay un nodo entre a y b para $\psi = 0$, lo que implica la disminución de la probabilidad de encontrar al electrón entre los protones. Ahora hay, en promedio, una deficiencia de carga negativa entre los protones y, en consecuencia, una fuerza de repulsión. Si actúan exclusivamente fuerzas de repulsión, el enlace no ocurre.

Una cuestión interesante consiste en conocer el comportamiento de la función de onda ψ_A antisimétrica H_2^+ cuando $R \to 0$. Evidentemente ψ_A no se transforma en la función de onda $1s$ de He^+ cuando $R = 0$. Sin embargo, ψ_A *se aproxima* a la función de onda $2p$ de He^+ (Fig. 8-5*e*), que es un modo en el origen. Puesto que el estado $2p$ de He^+ es un estado excitado, mientras que el estado $1s$ es el estado fundamental, He^+ en el estado antisimétrico debe tener más energía que cuando se encuentra en el estado simétrico, lo que concuerda con nuestra deducción acerca de la forma de las funciones de onda ψ_A y ψ_S, que en el primer caso es una fuerza de repulsión y en el segundo es una fuerza de atracción.

Un razonamiento similar al anterior nos permite estimar cómo la energía total del sistema H_2^+ varía con R. Primero, consideramos el estado simétrico. Cuando R es grande, la energía del electrón E_S debe ser la energía -13.6 eV del átomo de hidrógeno, mientras que la energía potencial electrostática V_p de los protones

$$V_p = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R} \tag{8.1}$$

tiende a 0 a medida que $R \to \infty$. (V_p es una cantidad positiva, como corresponde a una fuerza de repulsión.) Cuando $R = 0$, la energía del electrón debe ser igual a la del ion He^+, que es Z^2, o bien 4 veces la del átomo H. (Ver problema 25 del Cap. 4; el mismo resultado se obtiene a partir de la teoría cuántica de átomos de un electrón.) Así, $E_S = -54.4$ eV cuando $R = 0$. También cuando $R \to 0$, $V_p \to \infty$ como $1/R$. Tanto E_S como V_p se representan en la Fig. 8-6 como funciones de R: la forma de la curva para E_S puede ser

manera, excepto que la energía del electrón E_A cuando $R = 0$ es la del estado $2p$ del He^+. Esta energía es proporcional a Z^2/n^2; así con $Z = 2$ y $n = 2$ es igual a -13.6 eV del estado base del átomo de hidrógeno. Como $E_A \to -13.6$ eV también cuando $R \to \infty$, podemos pensar que la energía del electrón es constante, pero en realidad hay una pequeña depresión en distancias intermedias. Sin embargo, la depresión no es suficiente para dar un mínimo en la curva de energía total para el estado antisimétrico, como se indica en la Fig. 8-6, y así, en este estado, no se forma enlace.

8.4 LA MOLECULA H_2

La molécula H_2 contiene dos electrones en lugar del electrón único de H_2^+. De acuerdo con el principio de exclusión, ambos electrones pueden compartir el mismo *orbital* (es decir, estar descritos por la misma función de onda ψ_{nlm_l}) con tal que sus spines sean antiparalelos. Siendo el enlace de dos electrones, H_2 debería a primera vista ser más estable, el doble, que H_2^+—con una energía de enlace de 5.3 eV comparada con 2.65 eV para H_2^+. Sin embargo, los orbitales de H_2 no son iguales que los de H_2^+ debido a la repulsión electrostática entre los dos electrones en H_2, un factor que no se presenta en el caso de H_2^+. Esta repulsión debilita el enlace en H_2, de manera que la energía de enlace real es 4.5 eV en lugar de 5.3 eV. Por la misma razón, la distancia de enlace en Å, es 0.74 H_2^+Å, que es mayor de lo que indicarían las funciones de onda de H_2^+ no modificadas. La conclusión general, en el caso de H_2^+ de que la función de onda simétrica ψ_S conduce a un estado de enlace y la función de onda antisimétrica ψ_A a un estado de no enlace, permanece válida para H_2.

En la Sec. 7.3, el principio de exclusión se formulaba en función de simetría y antisimetría de funciones de onda, y se concluía que los sistemas de electrones siempre están descritos por funciones de onda antisimétricas. (Es decir, por funciones de onda que invierten el signo con el cambio de cualquier par de electrones.) Sin embargo, acabamos de decir que el estado de enlace en H_2 corresponde a ambos electrones que son descritos por una función de onda simétrica ψ_S, lo que parece contradecir la afirmación anterior.

Si observamos con mayor detenimiento, veremos que no hay tal contradicción. La función de onda *completa* $\Psi(1,2)$ de un sistema de dos electrones es el producto de una función de onda espacial $\psi(1,2)$ que describe las coordenadas del electrón y una función de spin $s(1,2)$ que describe la orientación de sus spines. El principio de exclusión requiere que la función de onda completa

$$\Psi(1,2) = \psi(1,2)s(1,2)$$

sea antisimétrica a un cambio de coordenadas y spines, no $\psi(1,2)$ por sí misma, y lo que hemos estado llamando orbital molecular es lo mismo que $\psi(1,2)$. Una función de onda antisimétrica completa Ψ_A puede resultar de la combinación

de una función de onda simétrica coordenada ψ_S y de una función de spin s_A antisimétrica, o de la combinación de una función de onda antisimétrica coordenada ψ_A y de una función de spin simétrica s_S. Esto es, únicamente

$$\Psi = \psi_S s_A$$

y

$$\Psi = \psi_A s_S$$

son aceptables. Si los spines de los dos electrones son paralelos, su función de spin es simétrica ya que no cambia de signo cuando se intercambian los electrones. Así, la función de onda coordenada ψ para dos electrones cuyos spines son paralelos debe ser antisimétrica; esto lo podemos expresar escribiendo

$$\psi\uparrow\uparrow = \psi_A$$

Por otra parte, si los spines de los dos electrones son antiparalelos, su función de spin es antisimétrica ya que cambia de signo cuando se intercambian los electrones, y esto se puede expresar en la forma

$$\psi\uparrow\downarrow = \psi_S$$

La ecuación de Schrödinger para la molécula H_2 no tiene solución exacta. De hecho, únicamente hay solución exacta posible para H_2^+; todos los demás sistemas moleculares tienen soluciones aproximadas. Los resultados del análisis detallado de la molécula H_2 se indican en la Fig. 8-7 para el caso en que los

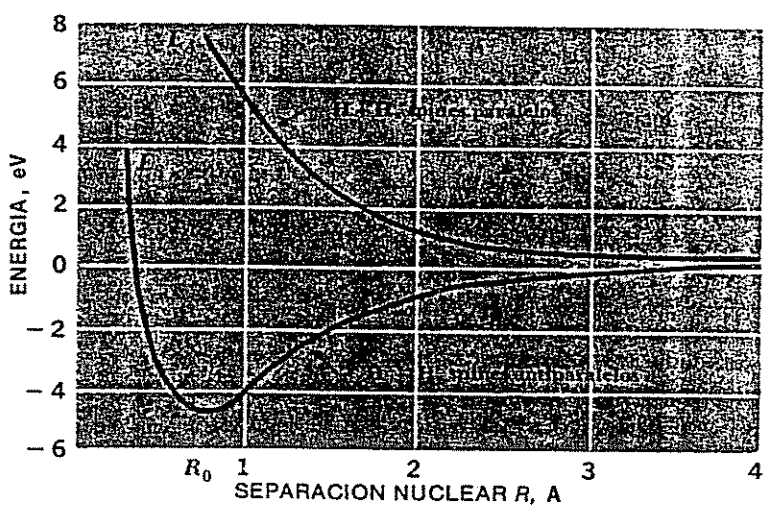


FIGURA 8-7 Variación de la energía del sistema H + H con su separación cuando los spines de los electrones son paralelos y antiparalelos.

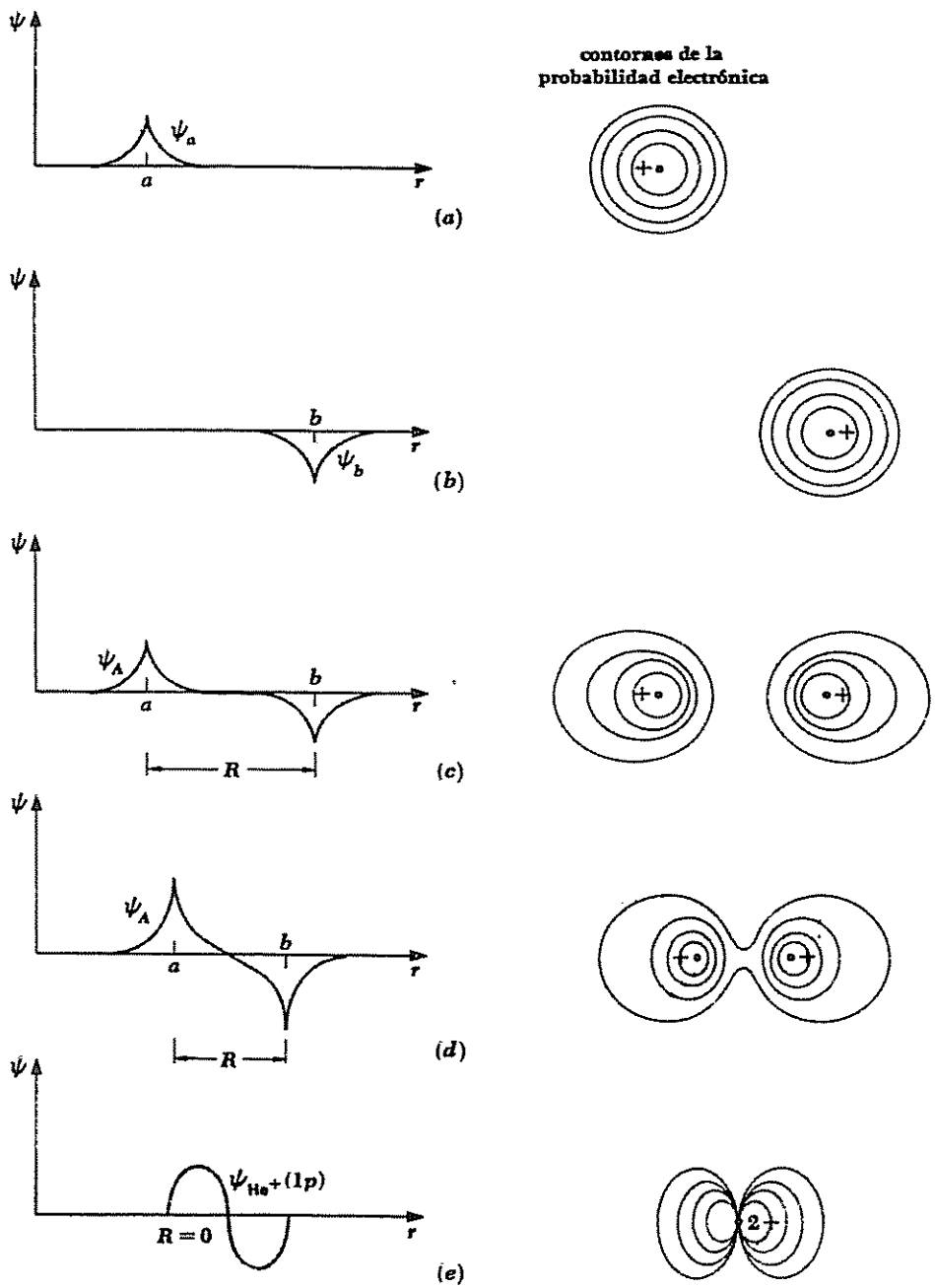


FIGURA 8-5 Combinación de dos funciones de onda 1s del átomo de hidrógeno para formar la función de onda ψ_A antisimétrica de H_2^+.

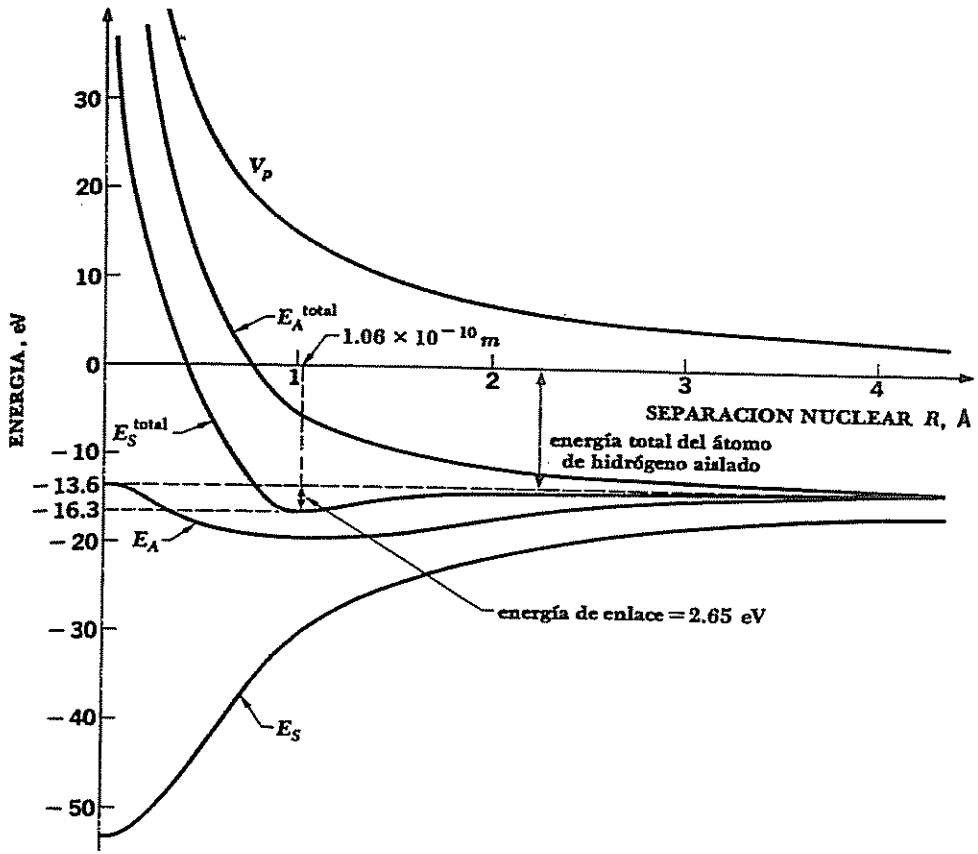


FIGURA 8-6 Repulsión electrónica y protónica y energía total en el H_2^+ en función de la separación nuclear R para los estados simétrico y antisimétrico. El estado antisimétrico no tiene mínimo en su energía total.

solamente aproximada si el cálculo no es detallado, pero podemos tener su valor para $R = 0$ y $R = \infty$ y, por tanto, V_p obedece a la Ec. 8.1.

La energía total del sistema E_S^{total} es la suma de la energía del electrón E_S y la energía potencial V_p de los protones. Evidentemente, E_S^{total} tiene un mínimo que corresponde a un estado molecular estable. Este resultado se ve confirmado por los datos experimentales sobre H_2^+, que indican una energía de enlace de 2.65 eV y una separación de equilibrio R de 1.06 Å. Por "energía de enlace" entendemos la energía necesaria para romper a H_2^+ en $H + H^+$; la energía *total* de H_2^+ es −13.6 eV del átomo de hidrógeno más −2.65 eV, que es la energía de enlace, o en total, −16.3 eV.

En el caso del estado antisimétrico, el análisis se lleva a cabo de igual

www.elsolucionario.org

electrones tengan spines paralelos y para el caso en que sus spines sean antiparalelos. La diferencia entre las dos curvas se debe al principio de exclusión, que impide que dos electrones en el mismo estado cuántico en un sistema tengan el mismo spin y, por tanto, conduce a una repulsión dominante cuando los spines son paralelos.

8.5 ORBITALES MOLECULARES

El enlace covalente en moléculas diferentes de H_2, tanto diatómicas como poliatómicas, es generalmente más complicado. Sería en efecto más complicado,a no ser por el hecho de que cualquier alteración en la estructura electrónica de un átomo debida a la proximidad de otro átomo está limitada a la capa electrónica externa (o de *valencia*). Esto se debe a dos causas. Primera, los electrones internos están mucho más fuertemente ligados y, por tanto, su respuesta es menor a influencias externas, en parte porque están más cerca de su propio núcleo y en parte porque están protegidos de la carga nuclear por algunos electrones intermedios. Segunda, las fuerzas de repulsión interatómicas en una molécula se hacen predominantes, mientras que las capas internas de sus átomos quedan relativamente lejanas. Una prueba directa a favor de la idea de que únicamente los electrones de valencia se ven implicados en el enlace químico la tenemos en los espectros de rayos X, que aparecen en las transiciones hacia estados electrónicos de capa interna; se ha encontrado que estos espectros son virtualmente independientes de la manera como se combinan los átomos en moléculas o sólidos.

Para estudiar el enlace químico, resulta útil poder imaginar las distribuciones en el espacio de los diferentes orbitales atómicos que cualitativamente se parecen a las del hidrógeno. Las imágenes de la Fig. 6-11 están limitadas a dos dimensiones y, por tanto, no son convenientes para este propósito. Aquí es más adecuado trazar superficies externas de $|\psi|^2$ constante en cada caso, que dibujar las regiones internas dentro de las cuales la probabilidad total de encontrar al electrón tenga algún valor definido, digamos 90 o 95%. Además, se puede indicar en cada lóbulo de este dibujo el signo de la función de onda ψ, aun cuando lo que se esté representando sea $|\psi|^2$. La Fig. 8-8 presenta diagramas de superficies externas para orbitales *s*, *p* y *d*. Estos diagramas muestran $|\Theta\Phi|^2$ en cada caso; se puede consultar la Fig. 6-10 para hallar las correspondientes densidades de probabilidad radial $|R|^2$ La densidad de probabilidad total $|\psi|^2$ es, por tanto, igual al producto de $|\Theta\Phi|^2$ por $|R|^2$.

En muchos casos, los orbitales que se presentan en la Fig. 8-8 se deducen de combinaciones lineales de dos funciones de onda atómicas, que representan estados de la misma energía; estas combinaciones son también soluciones de la ecuación de Schrödinger. Por ejemplo, un orbital p_x es el resultado de la suma de la función de onda $l = 1$ para $m_l = +1$ y para $m_l = -1$:

$$\psi_{p_x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{p_{+1}} + \psi_{p_{-1}})$$

orbital	n	l	m_l
s	1,2,3,...	0	0
p_x	2,3,4,...	1	±1
p_y	2,3,4,...	1	±1
p_z	2,3,4,...	1	0

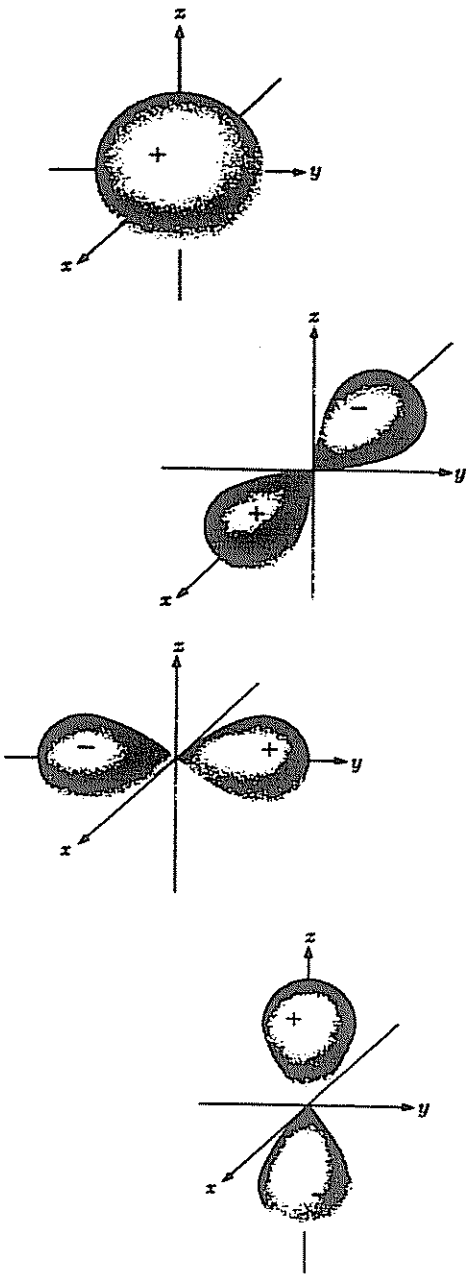


FIGURA 8-8 Diagramas de superficie límite para orbitales *s*, *p* y *d* atómicos. Los signos + y − se refieren al signo de la función de onda en cada región.

orbital	n	l	m_l
d_{xy}	3,4,5,...	2	± 2
d_{xz}	3,4,5,...	2	± 1
d_{yz}	3,4,5,...	2	± 1
d_{z^2}	3,4,5,...	2	0
$d_{x^2-y^2}$	3,4,5,...	2	± 2

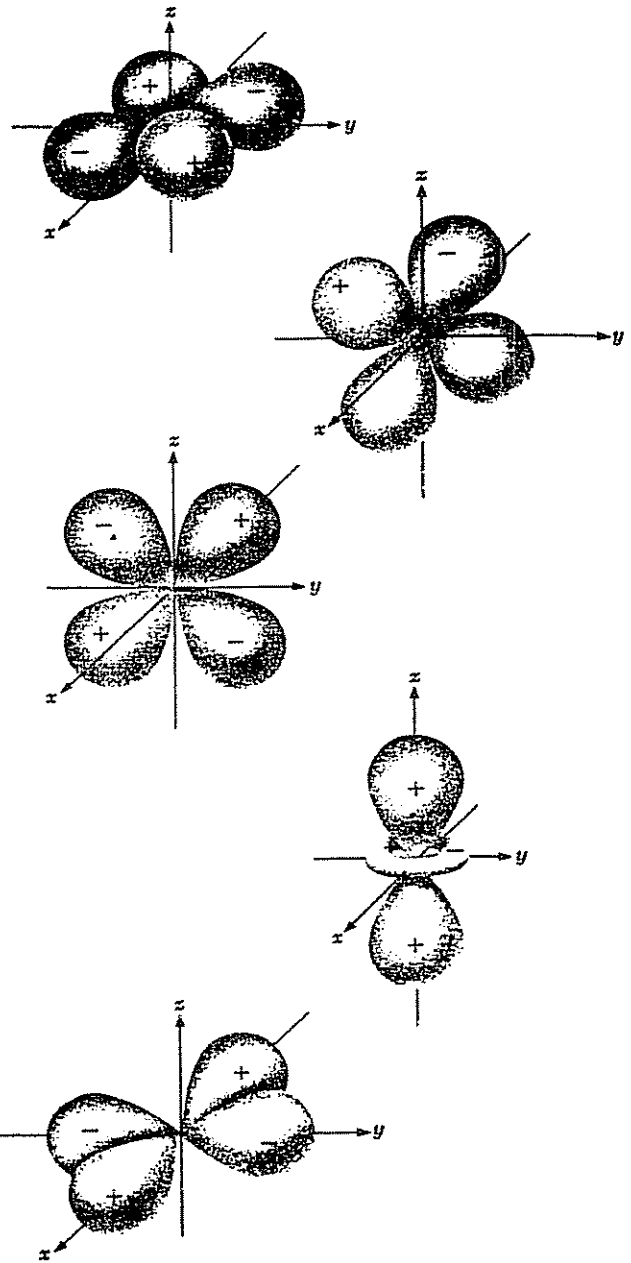


FIGURA 8-8 (Continuación.)

(Se requiere el factor $1/\sqrt{2}$ para normalizar a ψ_{p_x}.) Igualmente, la órbita p_y viene dada por

$$\psi_{p_y} = \frac{-i}{\sqrt{2}}(\psi_{p+1} - \psi_{p-1})$$

Sin embargo, el orbital p_z es idéntico a la función de onda $l = 1$, $m_l = 0$. Las funciones de onda que se combinan para formar los orbitales d_{xz}, d_{yz}, d_{xy} y $d_{x^2-y^2}$ se indican en la Fig. 8-8. Las interacciones entre dos átomos que dan lugar entre ellos a enlaces covalentes tienen distribuciones de densidad de probabilidad diferentes, para los electrones que participan en el enlace, de aquellas que son características de los átomos aislados en el espacio. Estas nuevas distribuciones se comprenden con mayor facilidad en función de los orbitales que se muestran en la Fig. 8-8.

Cuando dos átomos se unen, sus orbitales se superponen y resulta ya sea un aumento de la densidad de probabilidad entre ellos, lo que significa un *orbital molecular de enlace*, o bien, una disminución de la concentración, lo que significa un *orbital molecular de antienlace*. En la sección anterior, vimos cómo los orbitales $1s$ de dos átomos de hidrógeno se pueden combinar para formar un orbital de enlace ψ_S, o bien, un orbital de antienlace ψ_A. En la terminología de la física molecular, ψ_S se conoce como un orbital $1s\ \sigma$ y ψ_A como un orbital $1s\ \sigma^*$. La "1s" identifica a los orbitales atómicos que creemos se combinan para formar el orbital molecular. La letra griega σ significa que el estado molecular no tiene momentum angular en el eje de enlace (que se toma como eje z). Esta componente del momentum angular de una molécula está cuantizada y se restringe a los valores $\lambda\hbar$, donde $\lambda = 0, 1, 2, \ldots$. Los estados moleculares para los cuales $\lambda = 0$ se denominan σ, aquellos para los cuales $\lambda = 1$ se designan por π, aquellos para los cuales $\lambda = 2$ por δ, y así sucesivamente en orden alfabético. Finalmente, un orbital de antienlace se señala con un arterisco, como $1s\,\sigma^*$ para el orbital ψ_A de antienlace H_2.

La Fig. 8-9 presenta diagramas de superficie de enlace que muestran la formación de orbitales moleculares σ y π a partir de orbitales atómicos s y p en moléculas diatómicas homonucleares. Los orbitales σ muestran simetría de rotación en torno al eje de enlace, mientras que los orbitales π cambian de signo con una rotación de 180° en torno al eje de enlace. Como los lóbulos de los orbitales p_z están sobre el eje de enlace, estos orbitales atómicos forman orbitales moleculares σ. Los orbitales p_x y p_y forman ambos orbitales moleculares π.

Una molécula diatómica heteronuclear consta de dos átomos dispares. En general, los orbitales atómicos no son iguales en estas moléculas, de manera que los electrones de enlace no son compartidos igualmente por ambos átomos. El LiH es la molécula heteronuclear más sencilla y es un buen ejemplo de este efecto. La configuración normal del átomo H es $1s$, y la del átomo Li es $1s^2 2s$, lo que en cada caso significa que hay un único electrón de valencia. El orbital $1s$ de H y la $2s$ de Li forman un orbital de enlace σ en el LiH, que está ocupado por los dos electrones de valencia (Fig. 8-10). En ambos átomos, la

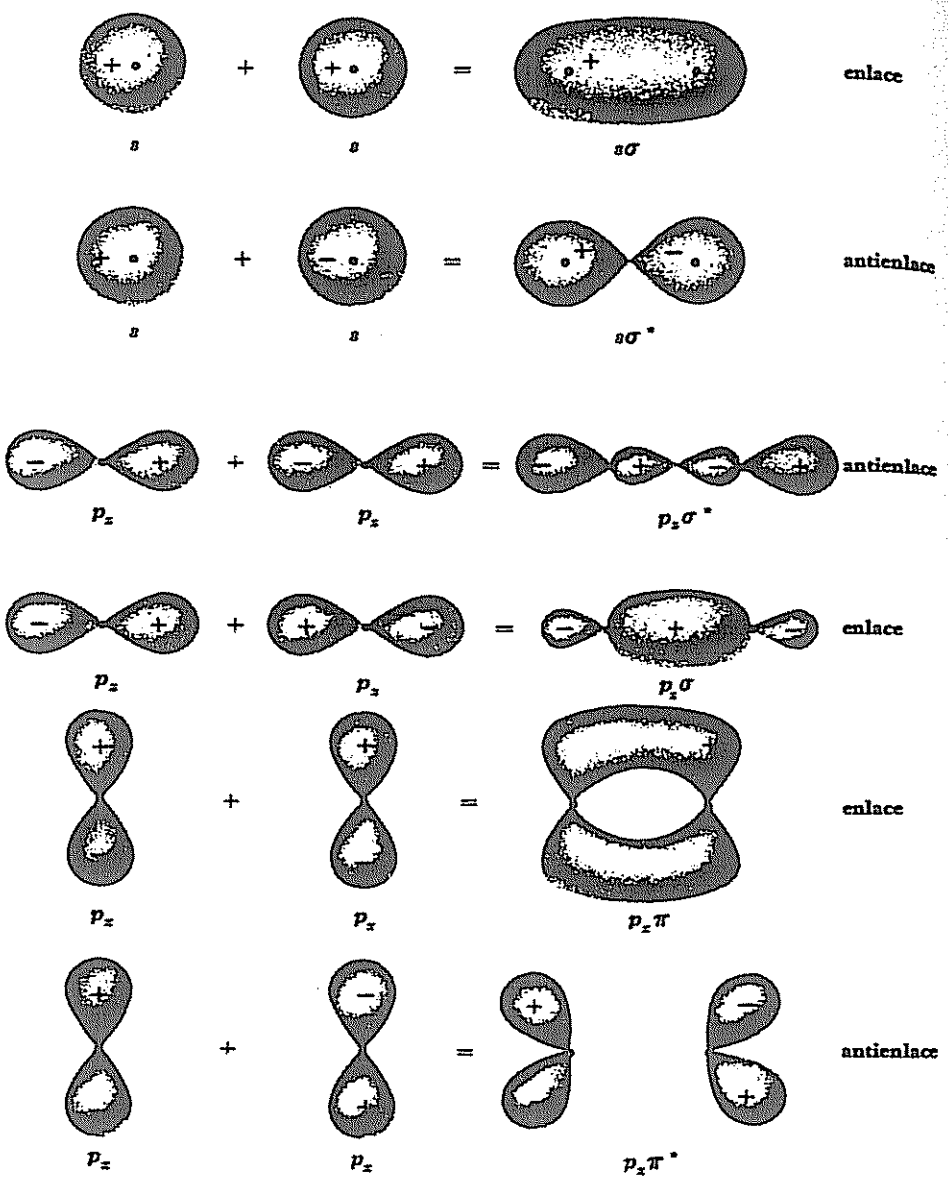


FIGURA 8-9 Diagramas de superficie límite que muestran la formación de orbitales moleculares de los orbitales atómicos *s* y *p* en moléculas diatómicas homonucleares. El eje *z* se encuentra a lo largo del eje internuclear de la molécula en cada caso, y el plano del papel es el plano *xy*. Los orbitales $p_x\pi$ y $p_y\pi^*$ son los mismos que los orbitales $p_x\pi$ y $p_x\pi^*$, excepto que presentan un desfasamiento de 90°.

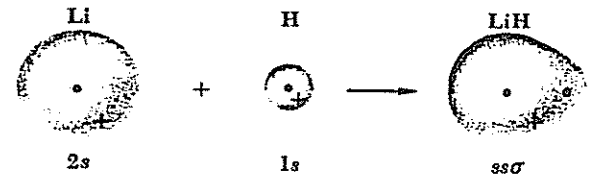


FIGURA 8-10 Los electrones de enlace en el LiH ocupan un orbital molecular σ formado a partir del orbital 1s del átomo H y del orbital 2s del átomo de Li.

carga nuclear efectiva que actúa sobre un electrón de valencia es $+e$ (en el Li, el núcleo de 2 electrones 1*s* blinda a $+2e$ de la carga nuclear total de $+3e$), pero en el Li un electrón de valencia está, en promedio, varias veces más lejos del núcleo que en H. (Las energías de ionización respectivas reflejan esta diferencia; la energía de ionización de H es 13.6 eV, mientras que la del Li es 5.4 eV.) De este modo, los electrones del orbital de enlace σ del LiH favorecen al núcleo H, y hay una separación parcial de la carga en la molécula.

Si hubiera una separación completa de carga en el LiH, como la hay en el NaCl, la molécula constaría de un ion Li^+ y de un ion H^-, y el enlace sería puramente iónico. Sin embargo, el enlace es sólo parcialmente iónico y los dos electrones de enlace pasan tal vez el 80% del tiempo cerca del núcleo H y el 20% cerca del núcleo Li. En comparación, los electrones de enlace de una molécula homonuclear como H_2 ó O_2 pasan el 50% del tiempo cerca de cada núcleo. Las moléculas cuyos enlaces no son puramente covalentes ni puramente iónicos reciben a veces el nombre de *covalentes polares*, ya que poseen momentos dipolares eléctricos. La tendencia relativa de un átomo a atraer electrones compartidos cuando es parte de un átomo se denomina su *electronegatividad*. Por ejemplo, en la molécula LiH, H es más electronegativo que Li.

En una molécula heteronuclear, imaginamos que los orbitales atómicos se combinan para formar un orbital molecular, tal vez de carácter diferente en cada átomo. Un ejemplo es el HF, donde el orbital atómico de H se une con el

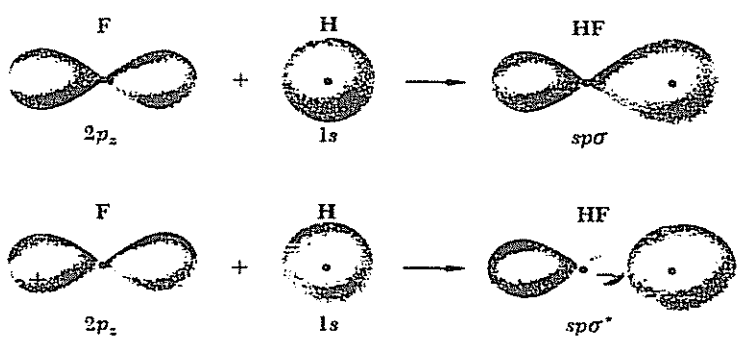


FIGURA 8-11 Orbitales moleculares de enlace y antienlace en HF.

www.elsolucionario.org

Tabla 8.1

ESTRUCTURAS ATOMICAS DE LOS ELEMENTOS DEL PRIMER Y SEGUNDO PERIODO. Las flechas indican las direcciones del spin de los electrones. De acuerdo con la regla de Hund (Sec. 7.6) los electrones de la misma subcapa de un átomo (mismo número cuántico orbital l) tienen tantos espines paralelos como les es posible.

Elemento		Número atómico	Estructura atómica	Ocupación de orbitales				
				$1s$	$2s$	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$
Hidrógeno	H	1	$1s$	↑				
Helio	He	2	$1s^2$	↑↓				
Litio	Li	3	$1s^2 2s$	↑↓	↑			
Berilio	Be	4	$1s^2 2s^2$	↑↓	↑↓			
Boro	B	5	$1s^2 2s^2 2p$	↑↓	↑↓	↑		
Carbono	C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$	↑↓	↑↓	↑	↑	
Nitrógeno	N	7	$1s^2 2s^2 2p^3$	↑↓	↑↓	↑	↑	↑
Oxígeno	O	8	$1s^2 2s^2 2p^4$	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑
Flúor	F	9	$1s^2 2s^2 2p^5$	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑
Neón	Ne	10	$1s^2 2s^2 2p^6$	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓

orbital $2p_z$ de F. Hay dos posibilidades (Fig. 8-11): un orbital molecular $sp\sigma$ de enlace y un orbital $sp\sigma^*$ de antienlace. Como el orbital $1s$ de H y el orbital $2p_z$ de F contienen cada uno un electrón (Tabla 8.1), el orbital $sp\sigma$ en HF está ocupado por dos electrones, y podemos considerar que HF se mantienen unidos por un único enlace covalente. En la Fig. 8-12 se muestra la estructura electrónica de la molécula HF.

Las configuraciones de los tres orbitales atómicos p, junto con su facultad de unirse con orbitales s para formar orbitales moleculares de enlace, permiten comprender las geometrías de muchas moléculas poliatómicas. La molécula de agua H_2O es un ejemplo. Improvisadamente podemos esperar una molécula lineal, H—O—H, ya que el oxígeno es más electronegativo que el hidrógeno y, en consecuencia, cada átomo de hidrógeno en H_2O presenta una pequeña carga positiva. La repulsión resultante entre los átomos H los mantendría tan lejos como fuera posible, es decir, en lados opuestos del átomo O. Sin embargo,

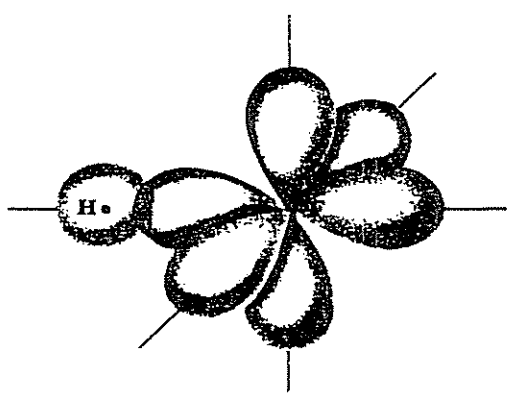


FIGURA 8-12 Orbitales atómicos de valencia en HF. Los orbitales atómicos superpuestos forman un orbital molecular σ de enlace.

en realidad la molécula de agua tiene una estructura parecida a O(—H)(—H), con un ángulo de 104.5° entre los dos enlaces O—H.

La forma curvada de la molécula de agua es fácil de explicar. En la Tabla 8.1 encontramos que los orbitales $2p_y$ y $2p_z$ en O están ocupadas sólo de una manera, en forma que cada una puede unirse al orbital $1s$ de un átomo H para formar un orbital de enlace $sp\sigma$ (Fig. 8-13). Los ejes y y z están a 90°, y el ángulo mayor de 104.5° que se encuentra en realidad, se puede atribuir a la repulsión mutua de los átomos H. En apoyo de la última idea, está el hecho de que los ángulos de enlace en las moléculas similares H_2S y H_2Se son 92° y 90°, respectivamente, que podemos atribuir a la gran separación de los átomos H alrededor de los átomos mayores S (número atómico $Z = 16$) y Se ($Z = 34$).

Un argumento similar explica la forma piramidal de la molécula de amoniaco NH_3. En la Tabla 8.1 encontramos que los orbitales atómicos $2p_x$, $2p_y$ y $2p_z$ en N están ocupados en forma sencilla, lo que significa que cada una de ellas forma un orbital de enlace $sp\sigma$ con el orbital $1s$ de un átomo H. Los orbitales moleculares de enlace en NH_3 deben centrarse, por tanto, a lo largo de los ejes x, y y z (Fig. 8-14) con una distancia entre enlaces N—H de 90°. Como en H_2O, los ángulos de enlace reales en NH_3 son algo mayores de 90°, en este caso 107.5°, debido a las repulsiones entre los átomos H. Los hídridos similares de los átomos mayores P ($Z = 15$) y As ($Z = 33$) presentan los ángulos de enlace menores, 94° y 90° respectivamente, a consecuencia otra vez de la reducción de repulsiones mutuas entre los átomos H más distantes.

8.6 ORBITALES HIBRIDOS

El método directo según el cual se han explicado las formas de las moléculas H_2O y NH_3 falla abiertamente en el caso del metano, CH_4. Un átomo de carbono tiene dos electrones en su orbital $2s$ y uno en cada orbital $2p_x$ y $2p_y$.

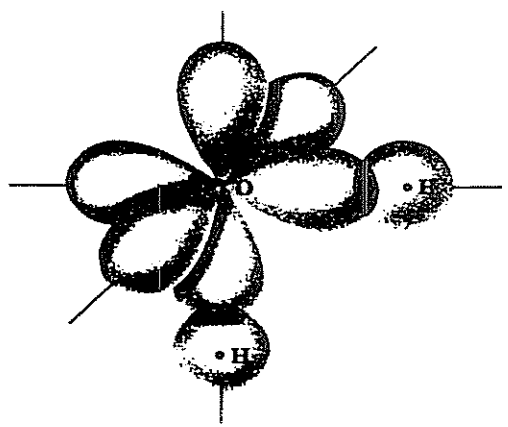


FIGURA 8-13 Orbitales atómicos de valencia en H_2O. El ángulo de enlace es en realidad de 104.5°.

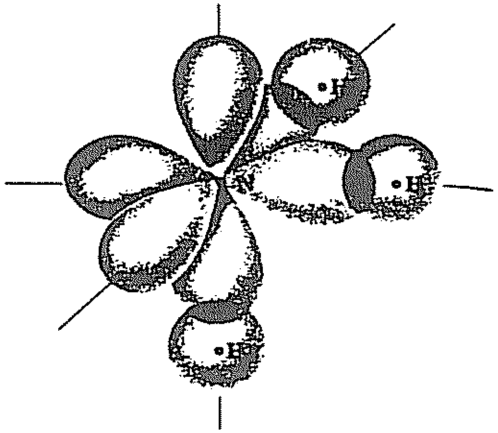


FIGURA 8-14 Orbitales atómicos de valencia en NH_3. Los ángulos de enlace son en realidad de 107.5°.

Así, deberíamos esperar que el hidrato de carbono fuera CH_2, con dos orbitales de enlace *spσ* y un ángulo de enlace de 90° o algo mayor. No obstante, tenemos el CH_4 y, además, su estructura es perfectamente simétrica, con moléculas tetraédricas cuyos enlaces C—H son exactamente equivalentes entre sí.

No podemos considerar al carbono como un caso excepcional aislado, una especie de átomo raro en el que un conjunto de circunstancias fortuitas conduce al CH_4 en lugar de al CH_2, porque el mismo fenómeno se presenta igualmente en otros átomos. Por ejemplo, un átomo de boro tiene la configuración $1s^2 2s^2 2p$, y forma BF_3 y BCl_3 en lugar de BF y BCl.

Evidentemente, lo que ha ocurrido en el carbono y el boro es que los orbitales 2*s*, a pesar de estar ocupados por pares de electrones y de tener menos energía —más estabilidad— que los orbitales 2*p*, por alguna razón entran en la formación de orbitales moleculares y, por tanto, permiten que los electrones 2*s* participen en la formación de enlaces entre C y B con otros átomos. Un átomo C tiene 4 electrones $n = 2$ en total y forma el CH_4, en tanto que un átomo B tiene 3 electrones $n = 2$ en total y forma el BF_3; comparten respectivamente cuatro y tres electrones con sus compañeros.

La manera más fácil de explicar la existencia del CH_4 es considerar que uno de los dos electrones 2*s* en C es "ascendido" al orbital vacante $2p_z$ de modo que haya un electrón en cada uno de los orbitales 2*s*, $2p_x$, $2p_y$ y $2p_z$ y se puedan formar cuatro enlaces. Elevar a un electrón del estado 2*s* al 2*p* significa aumentar la energía del átomo de C, pero parece razonable suponer que la formación de cuatro enlaces (para dar CH_4) en lugar de dos (para dar CH_2) disminuye la energía de la molécula resultante más de lo suficiente para compensar esto. La imagen anterior sugiere que tres de los enlaces en CH_4 son enlaces *spσ* y uno de ellos es un enlace *ssσ* que atañe al orbital 1*s* de H y ahora al orbital 2*s*, ocupado en forma sencilla, de C. Experimentalmente, sin embargo, se encuentra que los cuatro enlaces son idénticos.

La explicación correcta para el CH_4 se basa en un fenómeno denominado *hibridación* que se puede presentar cuando los estados 2*s* y 2*p* de un átomo en una molécula tienen una energía muy próxima. En este caso, el átomo puede contribuir con una combinación lineal de *ambos* orbitales atómicos a *cada* orbital molecular si de esta manera los enlaces son más estables que de otra. Que estos orbitales atómicos compuestos se pueden presentar se deduce de la naturaleza de la ecuación de Schrödinger, que es una ecuación diferencial parcial. Las funciones de onda 2*s* y 2*p* son soluciones de la misma ecuación si las energías correspondientes son las mismas, y la combinación lineal de soluciones de una ecuación diferencial parcial siempre es en sí una solución. En un átomo aislado, un electrón de un orbital 2*s* tiene menos energía (está más fuertemente unido) que un electrón del orbital 2*p* y, en consecuencia, no se presenta la tendencia a formar orbitales atómicos híbridos. Por otra parte, cuando un átomo en una molécula determinada aporta orbitales superpuestos *s* y *p* a los orbitales moleculares, los enlaces resultantes pueden ser más fuertes que los enlaces que pueden producir los orbitales *s* y *p* por sí solos, aun cuando las partes *p* de los híbridos tengan energías más altas en el átomo aislado. Así, se producen orbitales híbridos cuando la energía de enlace que ocasionan es mayor que la que producirían los orbitales puros, lo que ocurre en la práctica cuando los niveles *s* y *p* de un átomo están próximos.

En el CH_4 participan, en el enlace del carbono, cuatro orbitales híbridos equivalentes. Estos cuatro orbitales son híbridos de un orbital 2*s* y tres orbitales 2*p*, y podemos considerar que cada uno es una combinación de $\frac{1}{4}s$ y $\frac{3}{4}p$. Esta combinación particular recibe el nombre de híbrido sp^3. Su configuración se puede representar por medio de diagramas de superficie de enlace, como en la Fig. 8-15. Evidentemente, un orbital híbrido sp^3 está muy concentrado en una dirección única, lo que explica su facultad de producir un enlace excepcionalmente fuerte —lo suficientemente fuerte para compensar la necesidad de ascender un electrón 2*s* a un estado 2*p*.

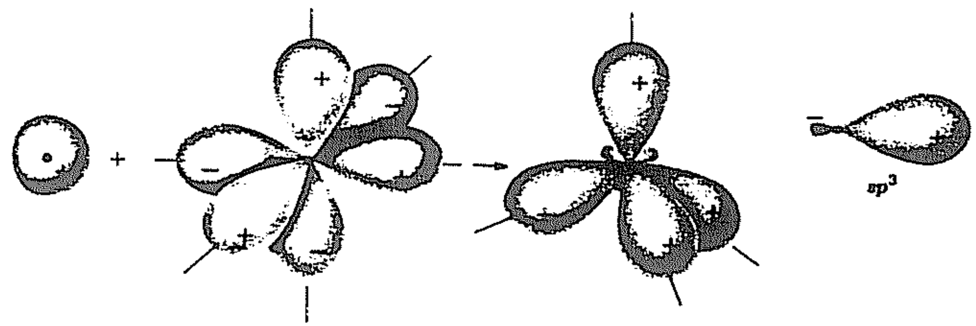


FIGURA 8-15 En hibridación sp^3, se combinan un orbital s y tres orbitales p en el mismo átomo para formar cuatro orbitales híbridos sp^3.

Hay que tener presente que los orbitales híbridos no existen en un átomo aislado, aun cuando éste se encuentre en estado excitado, pero surgen cuando el átomo entra en interacción con otros para formar una molécula.

La Fig. 8-16 representa a la molécula de CH_4. También muestra un modelo de esta molécula, que consta de un átomo C en el centro de una unidad cúbica que tiene átomo H en sus vértices alternos. El triángulo que presenta un átomo C en uno de los vértices, y dos átomos H en los otros vértices tiene lados de longitud $\sqrt{3/2}$, $\sqrt{3/2}$ y $\sqrt{2}$. Si el ángulo entre los enlaces C—H es θ, por la ley de los cosenos ($a^2 = b^2 + c^2 - 2bc\cos\theta$) tenemos

$$\cos\theta = -\frac{a^2 - b^2 - c^2}{2bc}$$

$$= -\frac{2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}}{2 \times \frac{3}{4}} = -\frac{1}{3}$$

$$\theta = 109.5°$$

que es lo que se ha determinado experimentalmente.

Los ángulos de enlace de 104.5° en H_2O y de 107.5° en NH_3 se aproximan evidentemente más al ángulo tetraédrico de 109.5° que se presenta en el enlace híbrido sp^3 que al de 90° esperado cuando se trata únicamente de orbitales p, en átomos O y N. Este hecho proporciona un método para explicar cómo la repulsión entre átomos H de estas moléculas se puede incorporar a la descripción de orbitales moleculares de enlace. En NH_3 hay tres orbitales de enlace doblemente ocupados, quedando un par de electrones no compartidos

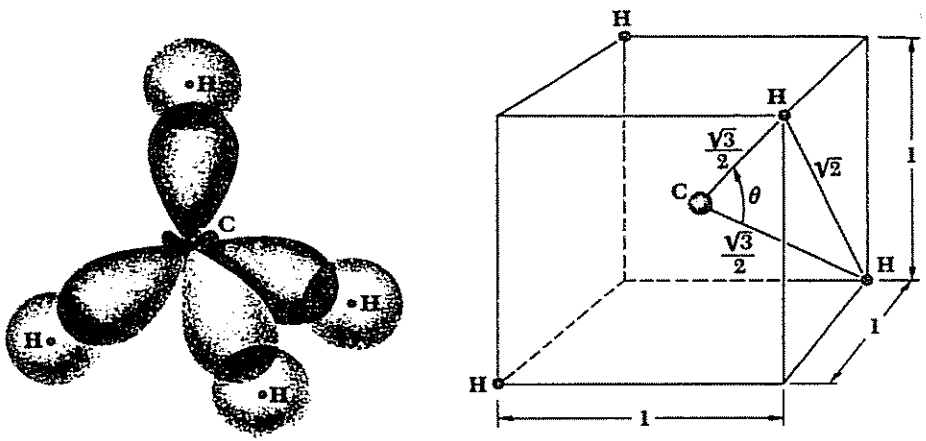


FIGURA 8-16 La molécula tetraédrica del metano (CH_4). Los orbitales superpuestos sp^3 del átomo del C y los orbitales 1s de los cuatro átomos del H forman orbitales moleculares de enlace.

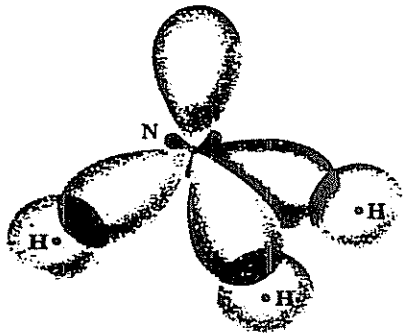


FIGURA 8-17 Orbitales atómicos de valencia en la molécula de amoniaco (NH_3) basados en la consideración de hibridación sp^3 en los orbitales N. Uno de los orbitales sp^3 está ocupado por dos electrones N y no contribuye al enlace.

que con anterioridad se supuso estaban en los orbitales 2s de N. Si N proporcionara orbitales híbridos sp^3 en lugar de orbitales p, los enlaces más separados significarían una energía menor para el sistema. En oposición a esta ganancia en estabilidad molecular está la necesidad de promover al par de electrones 2s, que no participan en el enlace, al estado híbrido de energía mayor sp^3 sin que intervengan en el proceso de enlace (a diferencia del caso de CH_4, donde los cuatro orbitales sp^3 sí participan). Por tanto, podemos considerar que el ángulo de enlace de 107.5° en NH_3 es el resultado de un compromiso entre los dos extremos de cuatro orbitales híbridos sp^3 en N, con una de ellas no enlazante y tres orbitales de enlace 2p y un orbital no enlazante 2s (pero de baja energía). La Fig. 8-17 es una representación de la molécula NH_3 sobre la base de una hibridación sp^3 que se puede comparar con la Fig. 8-14 que se trazó en base a orbitales p.

En el H_2O, como hay dos orbitales de enlace y dos no enlazantes en O, la tendencia a formar orbitales híbridos sp^3 es menor que en NH_3, donde hay tres orbitales de enlace y sólo uno no es de enlace. El ángulo de enlace menor en H_2O concuerda con esta conclusión. La estructura de la molécula de H_2O se estudiará posteriormente en la Sec. 10.4.

8.7 ENLACES CARBONO-CARBONO

Además del sp^3 se pueden presentar en los átomos de carbono otros dos tipos de orbitales híbridos. En la hibridación sp^2, un electrón de valencia se encuentra en un orbital p puro y los otros tres se encuentran en orbitales que son de caracter $\frac{1}{3}s$ y $\frac{2}{3}p$. La hibridación sp se caracteriza por dos electrones de valencia en orbitales puros p y otros dos en orbitales híbridos que son del tipo $\frac{1}{2}s$ y $\frac{1}{2}p$.

El etileno, C_2H_4, es un ejemplo de hibridación sp^2 en el que los dos átomos de carbono están unidos por dos enlaces. La Fig. 8-18 contiene el diagrama de

www.elsolucionario.org

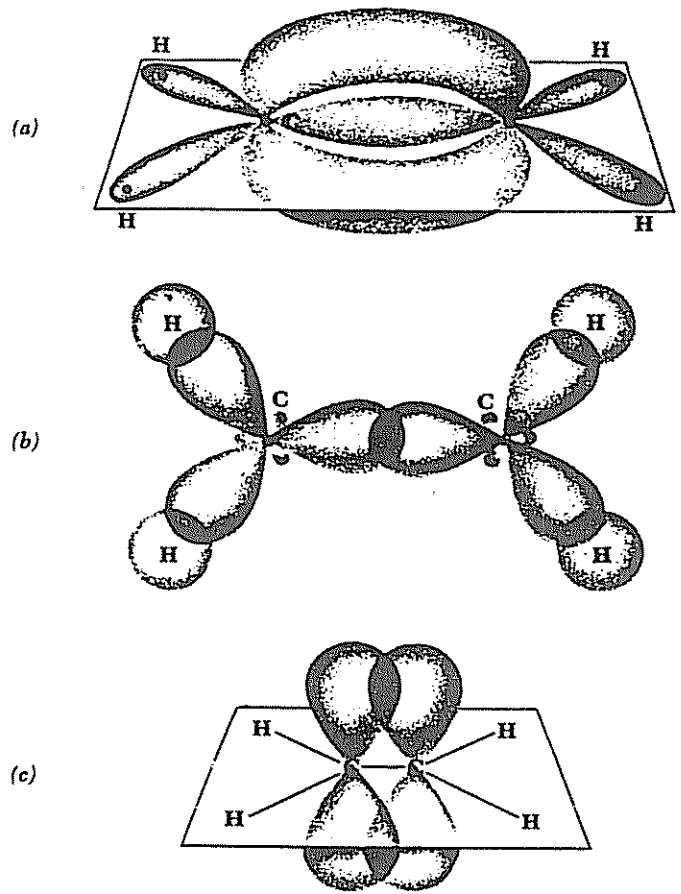
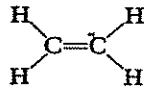


FIGURA 8-18 ***a)*** **Molécula de etileno (C_2H_4). Todos los átomos se encuentran en un plano perpendicular al del papel.** ***b)*** **Vista de arriba, muestra los orbitales híbridos sp^2 que forman enlaces σ entre los átomos de C y entre cada átomo de C y dos átomos de H.** ***c)*** **Vista de lado, muestra los orbitales puros p_z que forman un enlace π entre los átomos C.**

superficies de enlace y muestra los tres orbitales híbridos sp^2, que están separados en el plano del papel por 120°, y el orbital puro p_z en cada átomo C. Dos de los orbitales sp^2 de cada átomo C se superponen con orbitales s en átomos H para formar orbitales de enlace σ, y el tercer orbital sp^2 de cada átomo C forma un orbital de enlace σ con el mismo orbital de otro átomo C. Los orbitales p_z de los átomos C forman un enlace π entre sí, de manera que uno de los enlaces entre los átomos de carbono en un enlace σ y el otro es un enlace π. La fórmula estructural convencional del etileno es, por tanto,

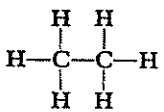


Etileno

El acetileno es un ejemplo de hibridación sp, en el que los dos átomos de carbono están unidos por tres enlaces. Un orbital híbrido sp de cada átomo C forma un enlace σ con un átomo H, y la segunda forma un enlace σ con el otro átomo. Los orbitales $2p_z$ y $2p_y$ de cada átomo C forman enlaces π, de manera que uno de los tres enlaces entre los átomos de carbono es un enlace σ_z y los demás son enlaces π_z y π_y (Fig. 8-19). La fórmula estructural convencional del acetileno es

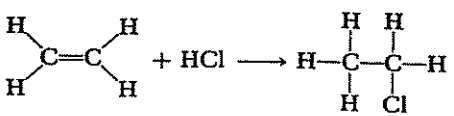
Acetileno

Tanto en el etileno como en el acetileno, los electrones de los orbitales π están "expuestos" en el exterior de las moléculas. Estos compuestos son mucho más reactivos químicamente que las moléculas que sólo poseen enlaces σ entre los átomos de carbono, como el etano



Etano

en el que todos los enlaces se han formado a partir de orbitales híbridos sp^3 de los átomos de carbono. Se dice que los compuestos de carbono con enlaces doble y triple son *no saturados* porque pueden añadir otros átomos a sus moléculas en reacciones como



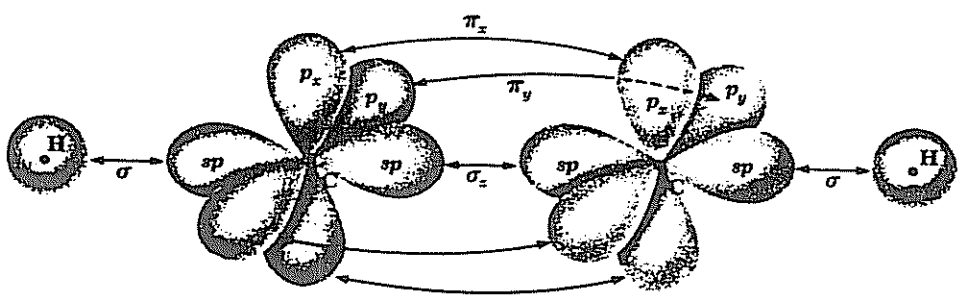


FIGURA 8-19 Molécula de acetileno (C_2H_2). Existen tres enlaces entre los átomos C, y un enlace σ entre los orbitales híbridos sp y dos enlaces π entre los orbitales puros p_z y p_y.

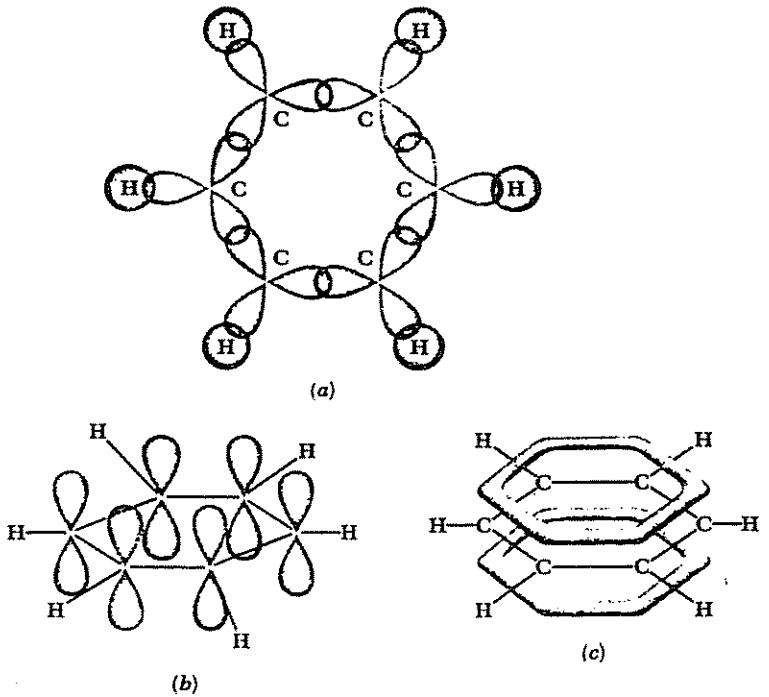


FIGURA 8-20 Molécula del benceno. *a)* La superposición entre los orbitales híbridos sp^2 en los átomos de C entre sí y con los orbitales s de los átomos H conduce a los enlaces σ. *b)* Cada átomo de C tiene un orbital p_z que está ocupado por un electrón. *c)* Los orbitales moleculares de enlace π que están formados por seis orbitales atómicos p_z constituyen una distribución probabilística continua de electrones alrededor de la molécula que contiene seis electrones no localizados.

En un compuesto *saturado*, como el metano o el etano, hay únicamente enlaces sencillos.

En el benceno, C_6H_6, los seis átomos C están dispuestos en un anillo hexagonal plano. Debido a que los enlaces carbono-carbono en el anillo de benceno están a 120°, concluimos que la estructura básica de la molécula es el resultado de enlaces por medio de orbitales híbridos sp^2. De los tres orbitales sp^2 por átomo C, uno forma un orbital de enlace σ con el orbital 1s de un átomo H y los otros dos forman orbitales de enlace σ con los orbitales sp^2 correspondientes de los átomos C sobre otro lado (Fig. 8-20). Esto deja un orbital $2p_z$ por átomo C, que presenta lóbulos por arriba y por debajo del plano del anillo. La totalidad de los seis orbitales $2p_z$ de la molécula se combinan para producir orbitales de enlace π que toman la forma de una distribución electrónica continua por arriba y por debajo del plano del anillo. Los seis

electrones pertenecen a la molécula en conjunto y no a un par de átomos en particular; se dice que estos electrones son *no localizados*.

8.8 NIVELES DE ENERGIA DE ROTACION

Los estados de energía molecular surgen de la rotación de una molécula en conjunto y de las vibraciones de los átomos que la constituyen, unos con relación a otros, así como de cambios en sus configuraciones electrónicas. Los estados de rotación están separados por intervalos de energía bastante pequeños (un valor típico es 10^{-3} eV) y los espectros que resultan de las transiciones entre estos estados se encuentran en la región de las microondas, que tienen longitudes de onda de 0.1 mm a 1 cm. Los estados de vibración están separados por intervalos de energía algo mayores (un valor típico es 0.1 eV), y los espectros de vibración se encuentran en la región de los infrarrojos, que tienen longitudes de onda de 10,000 Å a 0.1 mm. Los estados electrónicos moleculares tienen energías más altas, con separaciones típicas entre los niveles de energía de los electrones de valencia de varios electrón-volts y espectros en las regiones visible y del ultravioleta. Con frecuencia se pueden obtener imágenes detalladas de una molécula particular a partir de sus espectros, incluyendo longitudes de enlace, constantes de fuerza y ángulos de enlace. Con el fin de simplificar, restringiremos aquí el estudio a moléculas diatómicas, pero las ideas principales se aplican igualmente a moléculas más complicadas.

Los niveles de energía más bajos de una molécula diatómica surgen de la rotación en torno a su centro de masa. Podemos representar esta molécula como constituida por átomos de masas m_1 y m_2 separados por una distancia R (Fig. 8-21). El momento de inercia de esta molécula en torno a un eje que pasa a través de su centro de masa y perpendicular a la línea que une a los átomos, es

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 \tag{8.2}$$

donde r_1 y r_2 son las distancias de los átomos 1 y 2, respectivamente, al centro de masa. Como

$$m_1 r_1 = m_2 r_2 \tag{8.3}$$

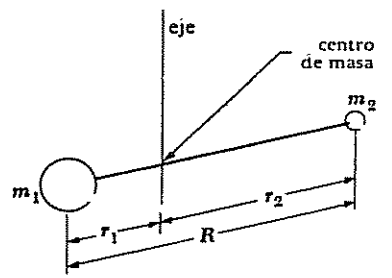


FIGURA 8-21 Una molécula diatómica puede girar alrededor de su centro de masa.

por definición, se puede expresar el momento de inercia por

$$I = \left(\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\right)(r_1 + r_2)^2$$

8.4 $$= m' R^2$$

donde

8.5 $$m' = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$ **Masa reducida**

que es la masa reducida de la molécula como se mencionó en la Sec. 4.9. La ecuación 8.4 establece que la rotación de una molécula diatómica es equivalente a la rotación de una partícula única de masa m' en torno de un eje situado a una distancia R.

El momentum angular L de la molécula tiene la magnitud

8.6 $$L = I\omega$$

donde ω es la velocidad angular. Como sabemos, el momentum angular es siempre de naturaleza cuantizada. Si llamamos J al *número cuántico de rotación*, tenemos

8.7 $$L = \sqrt{J(J+1)}\,\hbar \qquad J = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

La energía de una molécula en rotación es $\frac{1}{2}I\omega^2$, y, en consecuencia, sus niveles de energía se especifican mediante

$$E_J = \tfrac{1}{2}I\omega^2$$

$$= \frac{L^2}{2I}$$

8.8 $$= \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I}$$ **Niveles de energía de rotación**

Vemos cuántos tipos de energía y de velocidades angulares implica la rotación molecular. La molécula de monóxido de carbono (CO) tiene una longitud de enlace R de 1.13 Å, y las masas de los átomos ^{12}C y ^{16}O son respectivamente 1.99×10^{-26} kg y 2.66×10^{-26} kg. La masa reducida m' de la molécula de CO es, por tanto,

$$m' = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

$$= \frac{1.99 \times 2.66}{1.99 + 2.66} \times 10^{-26}\ \text{kg}$$

$$= 1.14 \times 10^{-26}\ \text{kg}$$

y su momento de inercia I es

$$I = m' R^2$$

$$= 1.14 \times 10^{-26}\ \text{kg} \times (1.13 \times 10^{-10}\ \text{m})^2$$

$$= 1.46 \times 10^{-46}\ \text{kg-m}^2$$

El nivel de energía rotacional más bajo corresponde a $J = 1$, y para este nivel en CO

$$E_{J=1} = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I} = \frac{\hbar^2}{I}$$

$$= \frac{(1.054 \times 10^{-34}\ \text{J-s})^2}{1.46 \times 10^{-46}\ \text{kg-m}^2}$$

$$= 7.61 \times 10^{-23}\ \text{J}$$

$$= 5.07 \times 10^{-4}\ \text{eV}$$

Esta no es energía grande, y a temperatura ambiente, cuando $kT \approx 2.6 \times 10^{-2}$ eV, casi todas las moléculas de una muestra de CO están en estados de rotación excitados. La velocidad angular de la molécula de CO, cuando $J = 1$, es

$$\omega = \sqrt{\frac{2E}{I}}$$

$$= \sqrt{\frac{2 \times 7.61 \times 10^{-23}\ \text{J}}{1.46 \times 10^{-46}\ \text{kg-m}^2}}$$

$$= 3.23 \times 10^{11}\ \text{rad/s}$$

Hasta ahora hemos considerado únicamente la rotación en torno a un eje perpendicular al eje de simetría de una molécula diatómica, como en la Fig. 8-21 —rotaciones de extremos. ¿Qué podemos decir acerca de rotaciones en torno al propio eje de simetría? La razón por la que se pueden ignorar estas últimas rotaciones es que la masa de un átomo se concentra casi completamente en su núcleo, cuyo radio es sólo $\sim 10^{-4}$ del radio del átomo. La contribución principal al momento de inercia de una molécula diatómica en torno a su eje de simetría proviene de sus electrones, que están concentrados en una región cuyo radio en torno al eje es aproximadamente la mitad de la longitud de enlace R, pero cuya masa total es únicamente $\frac{1}{4,000}$, aproximadamente, de la masa molecular total. Como los niveles de energía de rotación permitidos son proporcionales a $1/I$, la rotación en torno al eje de simetría debe incluir energías $\sim 10^4$ veces los valores E_J para rotaciones de extremos. Por tanto, cada rotación en torno al eje de simetría de una molécula diatómica implicaría energías de por lo menos varios eV. Como las energías de enlace también son de este orden de magnitud, la molécula probablemente se disociaría en cualquier ambiente en el que se indujera esta rotación.

Los espectros de rotación surgen de transiciones entre estados de energía de rotación. Unicamente moléculas que tienen momentos dipolares eléctricos pueden absorber o emitir fotones electromagnéticos en dichas transiciones, lo cual significa que moléculas diatómicas no polares como la H_2 y moléculas poliatómicas simétricas como la CO_2 (O=C=O) y la CH_4 (Fig. 8-16) no presentan espectros de rotación. (Sin embargo, se pueden producir transiciones entre estados de rotación en moléculas como H_2, CO_2 y CH_4 durante los choques.)

www.elsolucionario.org

Además, aun en moléculas que poseen momentos dipolares permanentes, no todas las transiciones entre estados de rotación implican radiación. Como en el caso de espectros atómicos (Sec. 6.10), algunas *reglas de selección* resumen las condiciones para que sea posible una transición radiativa entre estados de rotación. Para una molécula diatómica rígida, la regla de selección para transiciones de rotación es

8.9 $$\Delta J = \pm 1$$

En la práctica, los espectros de rotación siempre se obtienen en absorción, de manera que cada transición que se encuentra implica un cambio de algún estado inicial del número cuántico J al estado inmediato superior de número cuántico $J+1$. En el caso de una molécula rígida, la frecuencia del fotón absorbido es

$$\nu_{J\to J+1} = \frac{\Delta E}{h} = \frac{E_{J+1} - E_J}{h}$$

8.10 $$= \frac{\hbar}{2\pi I}(J+1)$$

Espectros de rotación

donde I es el momento de inercia para rotaciones de extremos. El espectro de una molécula rígida consta así de líneas separadas por la misma distancia, de acuerdo con la Fig. 8-22. Se puede medir la frecuencia de cada línea, y la transición correspondiente se puede determinar a partir de la secuencia de líneas; a partir de estos datos, se puede calcular con facilidad el momento de inercia de la molécula. (Alternativamente, las frecuencias de dos líneas consecutivas cualesquiera se pueden utilizar para determinar I si el espectrómetro utilizado no registra las líneas de más baja frecuencia en una secuencia espectral particular.) En CO, por ejemplo, la línea de absorción $J = 0 \to J = 1$ se presenta a una frecuencia de 1.153×10^{11} Hz. Por tanto,

$$I_{CO} = \frac{\hbar}{2\pi\nu}(J+1)$$
$$= \frac{1.054 \times 10^{-34}\ \text{J-s}}{2\pi \times 1.153 \times 10^{11}\ \text{s}^{-1}}$$
$$= 1.46 \times 10^{-46}\ \text{kg-m}^2$$

Como la masa reducida de la molécula de CO es 1.14×10^{-26} kg, la longitud de enlace R_{CO} es $\sqrt{I/m'} = 1.13$ Å. De esta manera se determinó la longitud de enlace para el CO como se anotó anteriormente en esta sección.

8.9 NIVELES DE ENERGIA DE VIBRACION

Cuando una molécula está lo suficientemente excitada, puede vibrar y girar. Como lo hicimos anteriormente, consideraremos sólo moléculas diatómicas. La

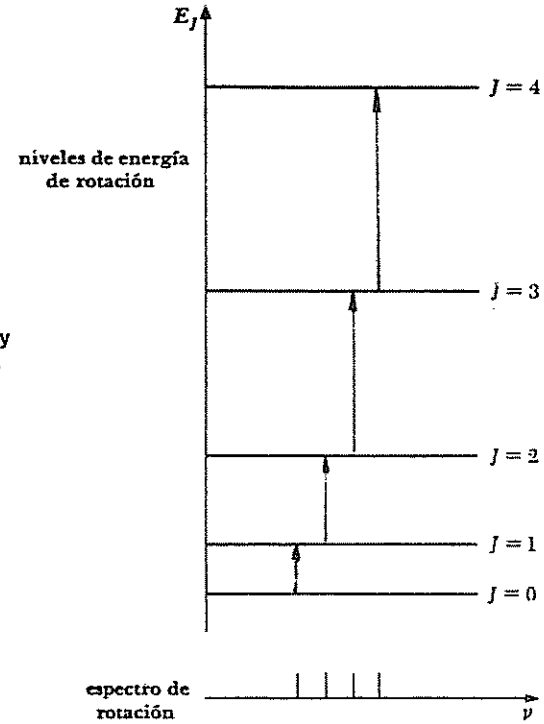


FIGURA 8-22 Niveles de energía y espectro de la rotación molecular.

Fig. 8-23 ilustra cómo la energía potencial de una molécula varía con la distancia internuclear R. En la proximidad del mínimo de esta curva, que corresponde a la configuración normal de la molécula, la forma de la curva se aproxima mucho a una parábola. En esta región entonces

8.11 $$V = V_0 + \tfrac{1}{2}k(R - R_0)^2$$

donde R_0 es la separación de equilibrio de los átomos. La fuerza interatómica que da lugar a esta energía potencial se puede determinar diferenciando V:

$$F = -\frac{dV}{dR}$$

8.12 $$= -k(R - R_0)$$

La fuerza es justamente la fuerza de restauración que ejerce un resorte estirado o comprimido —una fuerza de ley de Hooke— y, al igual que un resorte, una molécula adecuadamente excitada puede emprender oscilaciones armónicas simples.

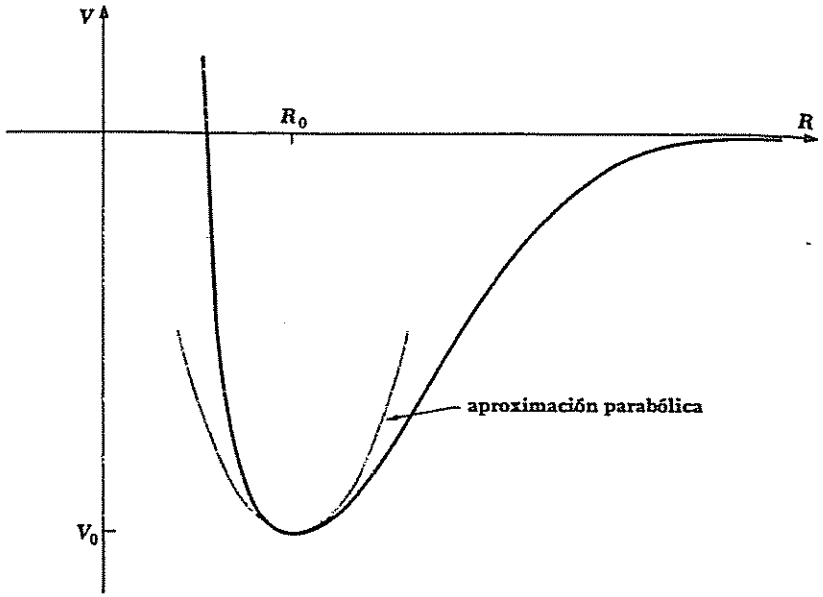


FIGURA 8-23 La energía potencial de una molécula diatómica en función de su distancia internuclear.

Clásicamente, la frecuencia de un cuerpo en vibración de masa m, unido a un resorte de fuerza constante k, es

8.13 $$\nu_0 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$$

La situación que tenemos en el caso de una molécula diatómica es un poco diferente de la de dos cuerpos de masas m_1 y m_2 unidas por un resorte, como en la Fig. 8-24. En ausencia de fuerzas externas, el momentum lineal del sistema permanece constante, y las oscilaciones de los cuerpos no pueden afectar al movimiento de sus centros de masa. Por esta razón, m_1 y m_2 vibran a un lado y otro del centro de masa en direcciones opuestas, y ambos alcanzan los extremos de sus respectivos movimientos al mismo tiempo. La frecuencia de oscilación de un oscilador de dos cuerpos de este tipo está dada por la Ec. 8.13,

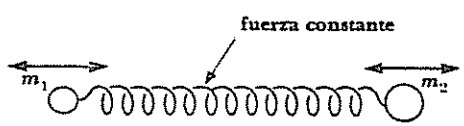


FIGURA 8-24 Un oscilador de dos cuerpos.

donde se sustituye la masa m' de la Ec. 8.5 por m:

8.14 $$\nu_0 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m'}}$$

Oscilador de dos cuerpos

Cuando por medio de la mecánica cuántica se resuelve el problema del oscilador armónico, como se hizo en el Cap. 5, se encuentra que la energía del oscilador se restringe a los valores

8.15 $$E_v = (v + \tfrac{1}{2})\,h\nu_0$$

donde v, que es el *número cuántico de vibración*, puede tener los valores

$$v = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

El estado de vibración más bajo ($v=0$) tiene la energía finita $\frac{1}{2}h\nu_0$, no el valor clásico 0; como se estudió en el Cap. 5, este resultado concuerda con el principio de incertidumbre, porque si la partícula oscilante estuviera estacionaria, la incertidumbre en su posición sería $\Delta x = 0$ y la incertidumbre de su momentum tendría que ser entonces infinita —y una partícula con $E=0$ no puede tener un momentum infinitamente incierto. Respecto de la Ec. 8.14, los niveles de energía de vibración de una molécula diatómica están especificados por

8.16 $$E_v = (v + \tfrac{1}{2})\,\hbar\sqrt{\frac{k}{m'}}$$

Niveles de energía de vibración

Calculemos la frecuencia de vibración de la molécula de CO y la distancia entre sus niveles de energía de vibración. La fuerza constante k del enlace en CO es 187 N/m (que es igual a 10 lb/pulg, lo cual no es excepcional para un resorte ordinario) y, como vimos en la Sec. 8.8, la masa reducida de la molécula es $m' = 1.14 \times 10^{-26}$ kg. En consecuencia, la frecuencia de vibración es

$$\begin{aligned}\nu_0 &= \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m'}} \\ &= \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{187\ \text{N/m}}{1.14 \times 10^{-26}\ \text{kg}}} \\ &= 2.04 \times 10^{13}\ \text{Hz}\end{aligned}$$

La separación ΔE entre los niveles de energía de vibración en CO es

$$\begin{aligned}\Delta E = E_{v+1} - E_v &= h\nu_0 \\ &= 6.63 \times 10^{-34}\ \text{J-s} \times 2.04 \times 10^{13}\ \text{s}^{-1} \\ &= 8.44 \times 10^{-2}\ \text{eV}\end{aligned}$$

que es considerablemente mayor que la separación entre niveles de energía de rotación. Debido a que $\Delta E > kT$ para estados de vibración en una muestra a

temperatura ambiente, la mayoría de las moléculas de esta muestra existen en el estado $v=0$ únicamente con sus energías punto cero. Esta situación es muy diferente de la característica de los estados de rotación, donde las energías mucho menores significan que la mayoría de las moléculas en una muestra a temperatura ambiente son excitadas a estados superiores.

Los estados de vibración más elevados de una molécula no obedecen a la Ec. 8.15 porque la aproximación parabólica a su curva de energía potencial se va haciendo cada vez menos válida a medida que aumenta la energía. En consecuencia, la distancia entre niveles de energía adyacentes de v mayor es menor que la distancia entre niveles adyacentes de v baja, como se indica en la Fig. 8-25. Este diagrama también indica la estructura fina en los niveles de vibración, causada por la excitación simultánea de niveles de rotación.

La regla de selección para transiciones entre estados de vibración es $\Delta v = \pm 1$ desde el punto de vista del oscilador armónico. Esta regla es fácil de comprender. Un dipolo oscilante, cuya frecuencia es ν_0, puede absorber o

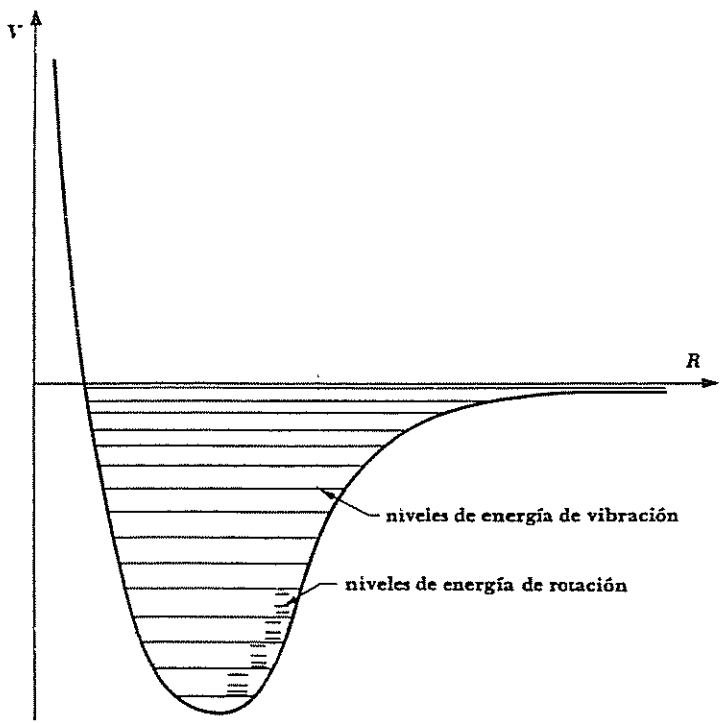


FIGURA 8-25 Energía potencial de una molécula diatómica en función de la distancia interatómica, que muestra los niveles de energía de vibración y de rotación.

emitir solamente radiación electromagnética de la misma frecuencia, y todos los cuantos de frecuencia ν_0 tienen la energía $h\nu_0$. El dipolo oscilante, en consecuencia, puede solamente absorber $\Delta E = h\nu_0$ cada vez, en cuyo caso su energía aumenta desde $(v + \frac{1}{2})h\nu_0$ hasta $(v + \frac{1}{2} + 1)h\nu_0$, y puede únicamente emitir $\Delta E = h\nu_0$ cada vez, en cuyo caso su energía disminuye desde $(v + \frac{1}{2})h\nu_0$ hasta $(v + \frac{1}{2} - 1)h\nu_0$. De ahí la regla de selección $\Delta v = \pm 1$.

Espectros de vibración puros sólo se observan en líquidos donde las interacciones entre moléculas adyacentes inhiben la rotación. Debido a que las energías de excitación implícitas en la rotación molecular son considerablemente menores que las implícitas en la vibración, las moléculas en movimiento libre en un gas o vapor casi siempre están en rotación, independientemente de su estado de vibración. Los espectros de estas moléculas no muestran líneas aisladas correspondientes a cada transición de vibración, sino al contrario, un gran número de líneas juntas debidas a transiciones entre los diferentes estados de rotación de un nivel de vibración y los estados de rotación del otro. En espectros obtenidos mediante un espectrómetro con resolución inadecuada, las líneas aparecen como una banda ancha, denominada *banda de vibración-rotación*.

A primera vista, las vibraciones y las rotaciones de una molécula ocurren independientemente unas de otras, y también podemos ignorar los efectos de distorsión centrífuga y de inarmonía. Bajo estas circunstancias, los niveles de energía de una molécula diatómica están especificados por

$$E_{v,J} = (v + \tfrac{1}{2})\hbar\sqrt{\frac{k}{m'}} + J(J+1)\frac{\hbar^2}{2I} \tag{8.17}$$

La Fig. 8-26 muestra los niveles $J=0,1,2,3$ y 4 de una molécula diatómica para los estados de vibración $v=0$ y $v=1$, junto con las líneas espectrales en absorción que son congruentes con las reglas de selección $\Delta v = +1$ y $\Delta J = \pm 1$. Las transiciones $v = 0 \rightarrow v = 1$ caen en dos categorías: la *rama p*, en la que $\Delta J = -1$ (es decir, $J \rightarrow J - 1$) y la *rama R*, en la que $\Delta J = +1$ $(J \rightarrow J + 1)$. A partir de la Ec. 8.17, las frecuencias de las líneas espectrales en cada rama vienen dadas por

$$\begin{aligned} \nu_P &= E_{1,J-1} - E_{0,J} \\ &= \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m'}} + [(J-1)J - J(J+1)]\frac{\hbar}{4\pi I} \\ &= \nu_0 - J\frac{\hbar}{2\pi I} \qquad J = 1, 2, 3, \ldots \end{aligned} \tag{8.18}$$

rama *P*

y

$$\begin{aligned} \nu_R &= E_{1,J+1} - E_{0,J} \\ &= \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m'}} + [(J+1)(J+2) - J(J+1)]\frac{\hbar}{4\pi I} \\ &= \nu_0 + (J+1)\frac{\hbar}{2\pi I} \qquad J = 0, 1, 2, \ldots \end{aligned} \tag{8.19}$$

rama *R*

www.elsolucionario.org

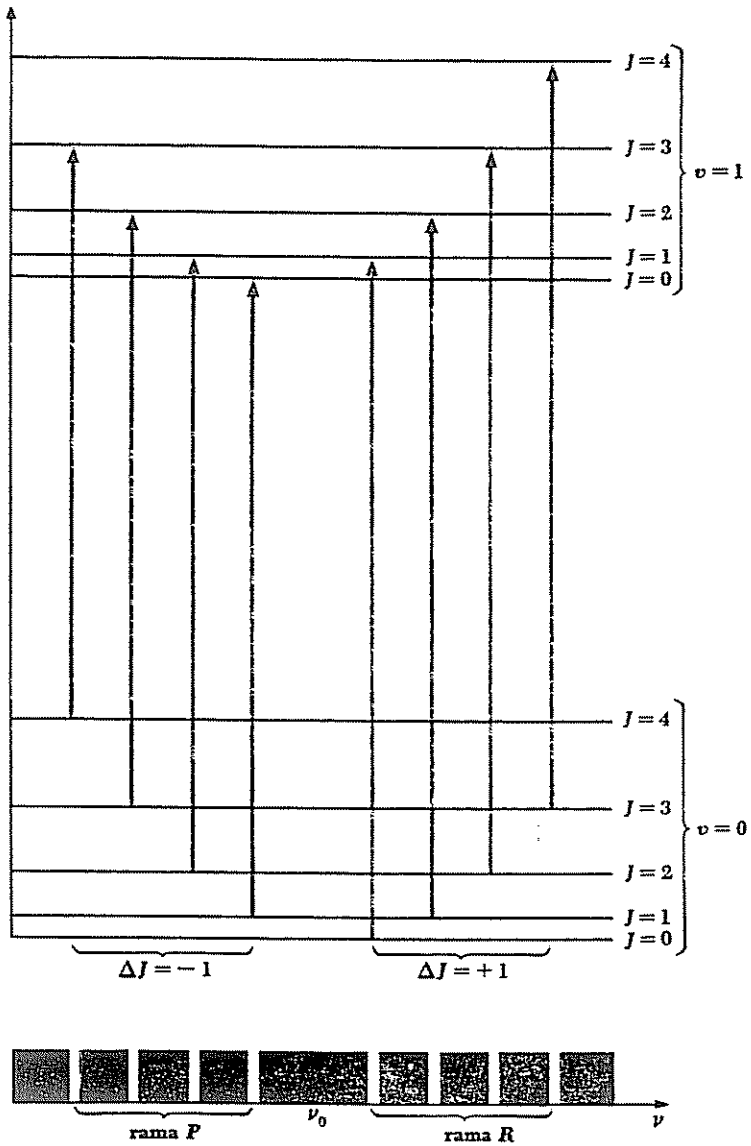


FIGURA 8-26 Estructura de rotación de las transiciones $v = 0 \rightarrow v = 1$ en una molécula diatómica. No hay línea en $\nu = \nu_0$ (la rama Q) debido a la regla de selección $\Delta J = \pm 1$.

No existe línea en $\nu = \nu_0$ debido a que las transiciones para las que $\Delta J = 0$ están prohibidas en las moléculas diatómicas. La distancia entre las líneas, tanto en la rama P como en la R, es $\Delta\nu = \hbar/2\pi I$; por tanto, el momento de inercia de una molécula se puede determinar a partir de su espectro infrarrojo de vibración-rotación, así como de su espectro de microondas de rotación pura. La Fig. 8-27 muestra la banda de absorción de vibración-rotación $v = 0 \rightarrow v = 1$ en el CO.

Una molécula que consta de varios átomos puede tener un gran número de modos normales de vibración diferentes. Algunos de estos modos atañen a toda la molécula, pero otros atañen únicamente a grupos de átomos cuyas vibraciones ocurren más o menos independientemente del resto de la molécula. Así, el grupo —OH tiene una frecuencia de vibración característica de 1.1×10^{14} Hz y el grupo $-NH_2$ tiene una frecuencia de 1.0×10^{14} Hz. La frecuencia de vibración característica de un grupo carbono-carbono depende del número de enlaces entre los átomos C: el grupo $-C-C-$ vibra aproximadamente a 3.3×10^{13} Hz, el grupo $C=C$ vibra aproximadamente a 5.0×10^{13} Hz, y el grupo $-C\equiv C-$ vibra aproximadamente a 6.7×10^{13} Hz (Figs. 8-28 y 8-29). (Como era de esperar, cuanto mayor es el número de enlaces carbono-carbono, mayor es el valor de la fuerza constante k y más alta la frecuencia.) En cada caso, la frecuencia no depende de la molécula particular o de la localización de la molécula en el grupo. Esta independencia hace que el espectro de vibración sea un instrumento válido para determinar estructuras moleculares. Un ejemplo es el ácido tioacético, cuya estructura se

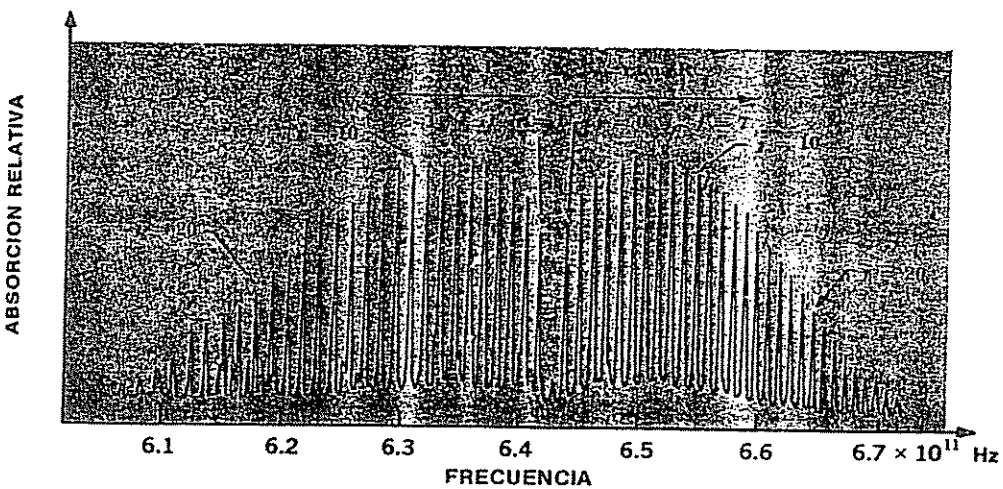


FIGURA 8-27 Banda de absorción de vibración-rotación $v = 0 \rightarrow v = 1$ en el CO bajo alta resolución. Las líneas se identifican por el valor de J en el estado de rotación inicial.

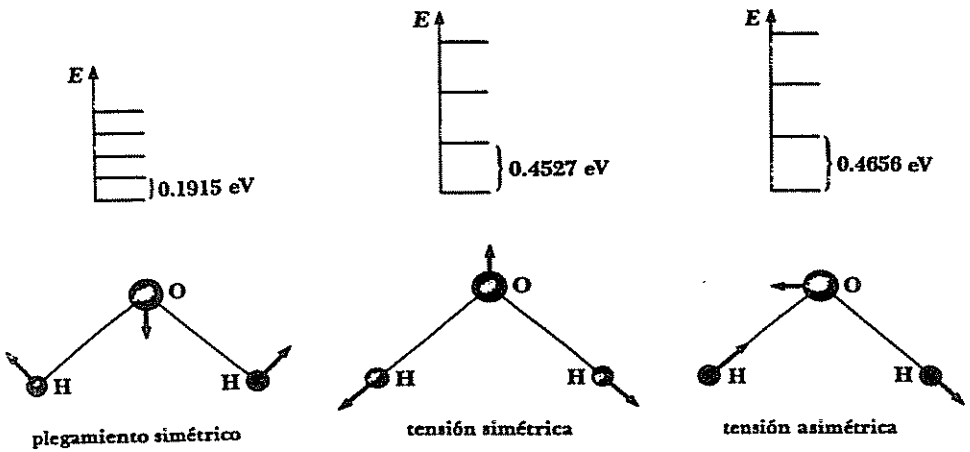


FIGURA 8-28 Modos normales de vibración de la molécula de H_2O y niveles de energía de cada modo.

puede concebir ya sea como $CH_3CO—SH$ o como $CH_3CS—OH$. El espectro de absorción de infrarrojo del ácido tioacético contiene líneas a frecuencias iguales a las frecuencias de vibración de los grupos $\rangle C=O$ y $—SH$, pero no presenta líneas correspondientes a los grupos $\rangle C=S$ o $—OH$, de manera que la primera alternativa es la correcta.

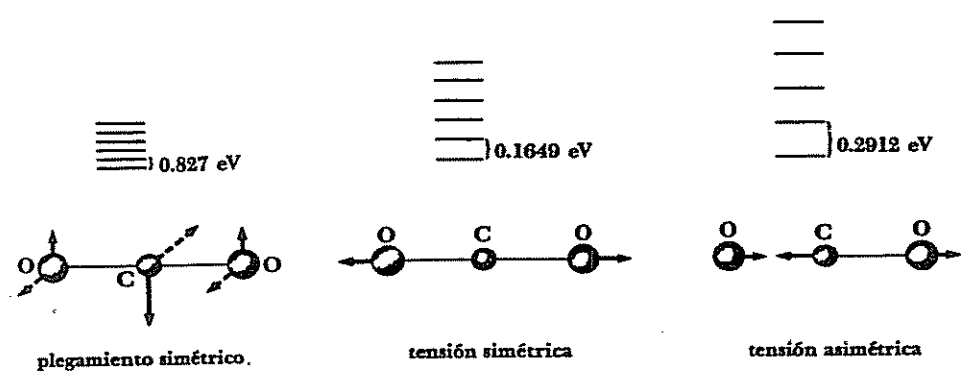


FIGURA 8-29 Modos normales de vibración de la molécula de CO_2 y niveles de energía de cada modo. El modo de plegamiento simétrico se puede presentar en los planos perpendiculares.

8.10 ESPECTROS ELECTRONICOS MOLECULARES

Las energías de rotación y vibración en una molécula se deben al movimiento de sus núcleos atómicos, ya que los núcleos contienen esencialmente la totalidad de la masa molecular. Los electrones moleculares también se pueden excitar a niveles de energía más elevados que los correspondientes al estado base de la molécula, aunque la separación entre estos niveles es mucho mayor que la separación entre niveles de rotación o de vibración. Las transiciones electrónicas implican radiación en las partes visible o ultravioleta del espectro, donde cada transición aparece como una serie de líneas muy juntas, llamadas banda, debidas a la presencia de estados de rotación y vibración diferentes en cada estado electrónico (ver Fig. 4-12). Todas las moléculas presentan espectros electrónicos, ya que un cambio en el momento del dipolo acompaña siempre a un cambio en la configuración electrónica de una molécula. Por tanto, moléculas homonucleares, como H_2 y N_2, que nunca presentan espectros de rotación ni de vibración porque carecen de momentos dipolares permanentes, tienen, sin embargo, espectros que poseen estructuras finas de vibración y rotación que permiten conocer sus momentos de inercia y sus constantes de fuerza de enlace.

La excitación electrónica en una molécula poliatómica conduce comúnmente a un cambio en su forma, que se puede determinar a partir de su estructura fina de rotación en su espectro de bandas. El origen de estos cambios reside en los diferentes caracteres de las funciones de onda de los electrones en estados distintos que en correspondencia conducen a tipos de enlace diferentes. Por ejemplo, una transición electrónica posible en una molécula cuyos enlaces implican orbitales híbridos sp, es la que conduce a un estado de energía superior en el que los enlaces incluyen orbitales p puros. En los primeros esquemas de este capítulo podemos ver que, en una molécula como la de BeH_2, el ángulo de enlace en el caso de la hibridación sp es 180°, y la molécula es lineal (H—Be—H), mientras que el ángulo de enlace en el caso de orbitales puros p, es 90°, y la molécula está doblada (H—Be).
|
H

Una molécula en un estado electrónico excitado puede perder energía y volver a su estado base de varias maneras. La molécula puede, por supuesto, sencillamente emitir un fotón de la misma frecuencia que el fotón que absorbe y volver así al estado base en un solo paso. Otra posibilidad es la *fluorescencia*; la molécula puede ceder parte de su energía de vibración en choques con otras moléculas, de manera que la transición radiativa decreciente se origina a partir de un nivel de vibración inferior en el estado electrónico más alto (Fig. 8-30). La radiación fluorescente es así de frecuencia más baja que la de la radiación absorbida.

En espectros moleculares, como en los atómicos, las transiciones que producen radiación entre estados electrónicos de spin total diferente están prohibidas (ver Sec. 7-11). La Fig. 8-31 muestra una situación en la que la

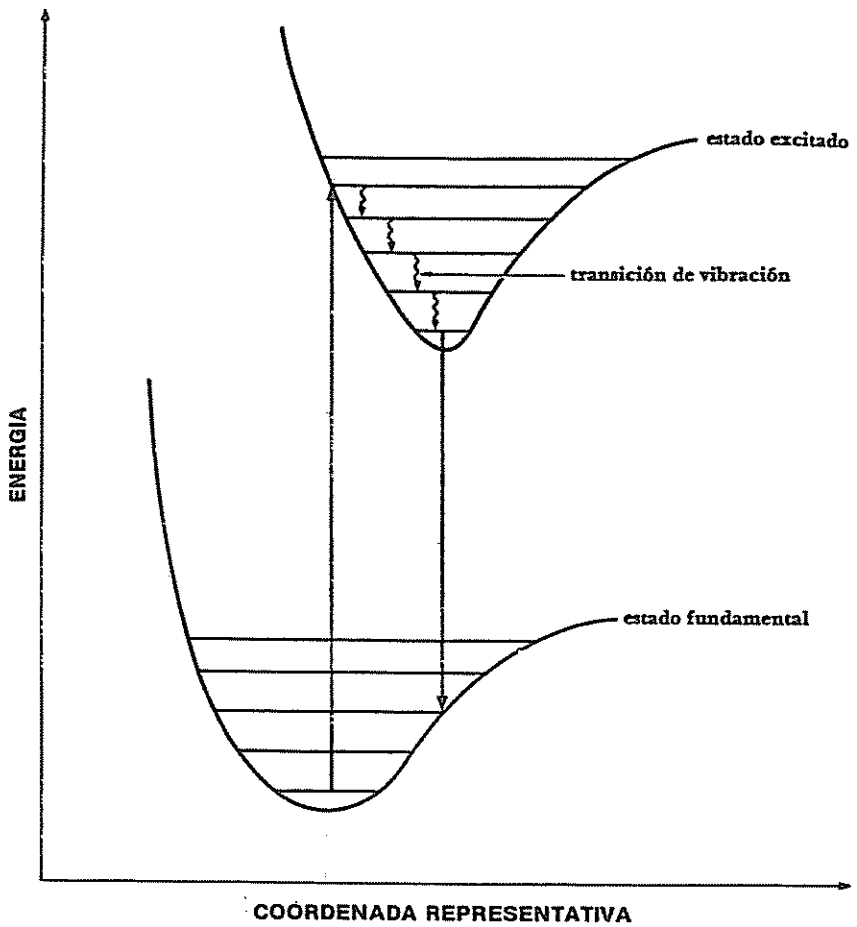


FIGURA 8-30 Origen de la fluorescencia.

molécula en su estado base singulete (S = 0) absorbe un fotón y se eleva a un estado excitado singulete. En choques, la molécula puede emprender transiciones sin radiación hacia niveles de vibración más bajos, que puede ser que tengan aproximadamente la misma energía que uno de los niveles en el estado excitado triplete (S = 1), y así existe cierta probabilidad de que ocurra una desviación hacia el estado triplete. Choques posteriores en el estado triplete llevan a la energía de la molécula por debajo del punto de cruce, de

manera que ahora queda atrapada en el estado triplete y posteriormente alcanza el nivel $v = 0$. Una transición radiante de un estado triplete a uno singulete está "prohibida" por las reglas de selección, lo que en realidad significa no que sea imposible que ocurra, sino que la probabilidad de que ocurra es muy pequeña. En consecuencia, estas transiciones tienen una vida media muy larga, y la *radiación fosforescente* resultante se puede emitir durante minutos, y aun horas, después de la absorción inicial.

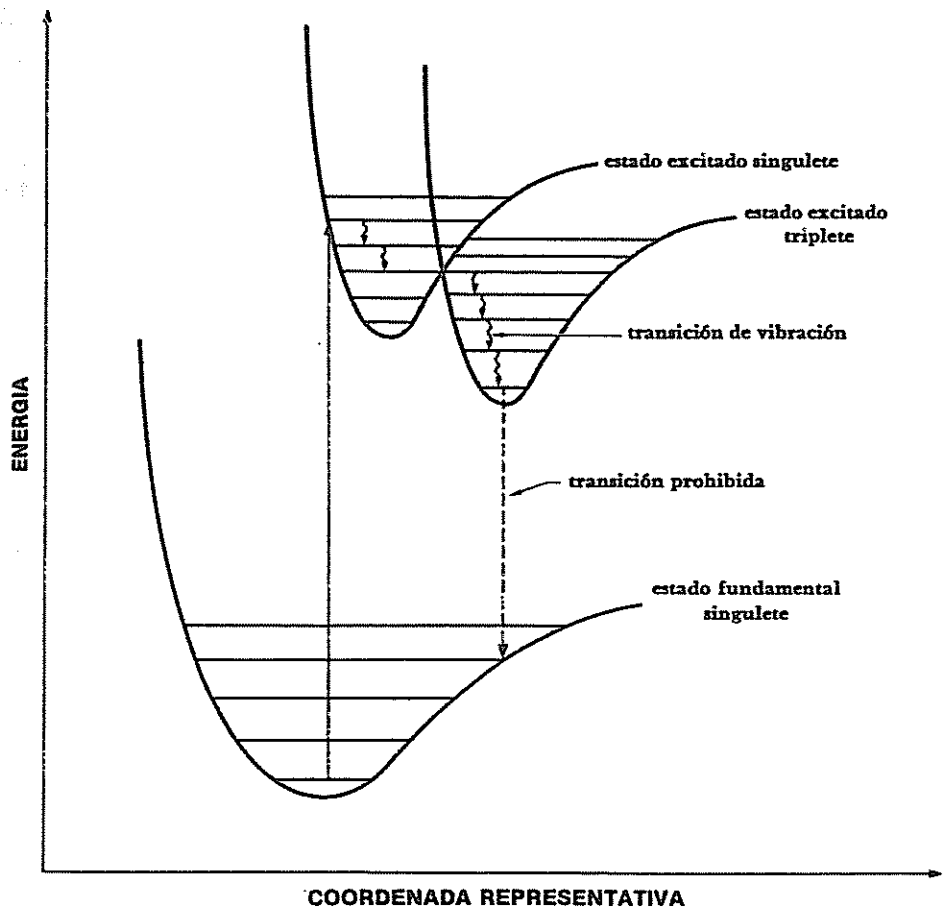


FIGURA 8-31 Origen de la fosforescencia. La transición final se retrasa porque viola las reglas de selección para transiciones electrónicas.

www.elsolucionario.org

Problemas

1. ¿A qué temperatura la energía cinética promedio de las moléculas en una muestra de hidrógeno es igual a su energía de enlace?

2. Aunque la molécula He_2 es inestable y no se presenta, el ion molecular He_2^+ es estable y tiene una energía de enlace casi igual a la de H_2^+. Explicar esta observación.

3. ¿Cuál tendrá la mayor energía de enlace F_2, F_2^+ o F_2^-? ¿La energía de enlace más baja?

4. La energía de ionización de H_2 es 15.7 eV y la del H es 13.6 ¿Por qué son tan diferentes?

5. La línea de absorción de rotación $J = 0 \rightarrow J = 1$ ocurre a 1.153×10^{11} Hz en $^{12}C^{16}O$ y a 1.102×10^{11} Hz en $C^{16}O$. Encontrar el número de masa del isótopo desconocido del carbono.

6. Calcular las energías de los cuatro estados de energía de rotación más bajos de las moléculas H_2 y D_2, donde D representa al átomo de deuterio ^2_1H.

7. El espectro de rotación del HCL contiene las siguientes longitudes de onda:

12.03×10^{-5} m
9.60×10^{-5} m
8.04×10^{-5} m
6.89×10^{-5} m
6.04×10^{-5} m

Si se trata de los isótopos ^1_1H y $^{35}_{17}Cl$, encontrar la distancia entre los núcleos de hidrógeno y cloro en una molécula de HCl. (La masa de ^{35}Cl es 5.81×10^{-26} kg.)

8. Calcular la frecuencia clásica de rotación de un cuerpo rígido cuya energía está dada por la Ec. 8.8, para estados de $J=J$ y $J=J+1$ y demostrar que la frecuencia de la línea espectral, que está asociada con una transición entre estos estados, es intermedia entre las frecuencias de rotación de los mismos.

9. Una molécula de $^{200}Hg^{35}Cl$ emite un fotón de 4.4 cm cuando emprende una transición de rotación desde $J=1$ hasta $J=0$. Encontrar la distancia interatómica en esta molécula. (Las masas de ^{200}Hg y ^{35}Cl son, respectivamente, 3.32×10^{-25} kg y 5.81×10^{-26} kg.)

10. Considerar que la molécula H_2 se comporta exactamente como un oscilador armónico, con una fuerza constante de 516 N/m y encontrar el número cuántico de vibración correspondiente a su energía de disociación 4.5 eV.

11. El enlace entre los átomos de hidrógeno y cloro en una molécula $^1H^{35}Cl$ tiene una fuerza constante de 516 N/m. ¿Qué probabilidad hay de que una molécula de HCl vibre en su primer estado de vibración excitado a la temperatura ambiente?

12. El deuterio, isótopo del hidrógeno, tiene una masa atómica aproximadamente igual al doble de la del hidrógeno común ¿Cuál de los dos H_2 o HD, tienen la energía punto cero mayor? ¿Cómo afecta esto a las energías de enlace de las dos moléculas?

13. La constante de fuerza de la molécula $^1H^{19}F$ es 966 N/m. Encontrar la frecuencia de vibración de la molécula.

14. El calor específico molar experimental del gas hidrógeno a volumen constante se representa en la Fig. 8-32 en función de la temperatura absoluta. (La escala de la temperatura es logarítmica.) Puesto que cada grado de libertad (es decir, cada modo de poseer energía) en una molécula gaseosa contribuye con ~1 kcal/kmol °K al calor específico del gas, esta curva se interpreta como que solo es posible para las moléculas de hidrógeno a muy baja temperatura, un movimiento de traslación con tres grados de libertad. A temperaturas más altas, el calor específico sube a ~5 kcal/kmol °K, indicando

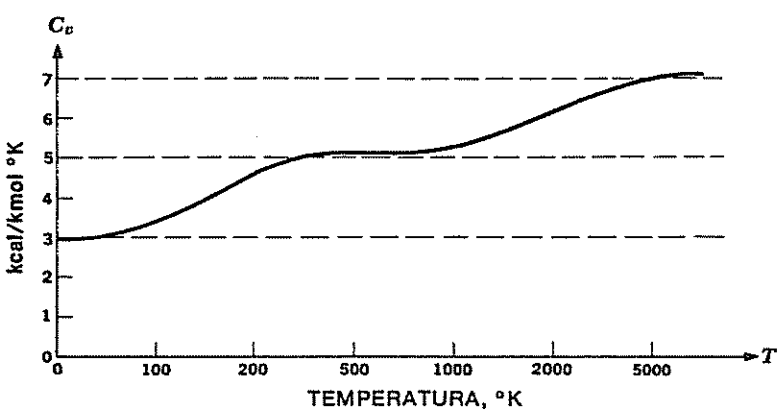


FIGURA 8-32 Calor específico molar del hidrógeno a volumen constante.

que se dispone de dos grados más de libertad, y a temperaturas aún más altas, el calor específico aumenta ~7 kcal/kmol °K, indicando dos grados libertad adicionales. Estos dos pares de grados de libertad adicionales representan respectivamente movimientos de rotación que pueden tener lugar alrededor de dos ejes independientes y perpendiculares a los ejes de simetría de las moléculas de H_2, y de movimiento de vibración, en el que los dos grados de libertad corresponden a los dos modos en que la molécula posee energía cinética y potencial. *a*) Comprobar esta interpretación de la Fig. 8-32, calculando la temperatura a la que kT es igual a la mínima energía de rotación y de vibración que puede tener una molécula de H_2. Suponer que la constante de fuerza del enlace en el H_2 es de 573 N/m, y que la separación entre los átomos de H es de 7.42×10^{-11} m. (A estas temperaturas, la mitad aproximadamente de las moléculas están girando o vibrando, aunque en cada caso algunas están en estados más altos que $J=1$ o $v=1$.) *b*) Para justificar que se consideran únicamente 2 grados de libertad rotacional en la molécula de H_2, calcular la temperatura a la que kT es igual a la energía de rotación mínima que una molécula de H_2 puede tener para que gire alrededor de sus ejes de simetría. *c*) ¿Cuántas rotaciones por vibración efectúa una molécula de H_2 con $J=1$ y $v=1$?

MECANICA ESTADISTICA 9

La *mecánica estadística* es la rama de la física que intenta relacionar, en un conjunto de partículas, las propiedades macroscópicas con las propiedades microscópicas. La mecánica estadística, como su nombre lo indica, no trata del movimiento o interacción de las partículas individuales, sino que intenta aclarar su comportamiento *más probable*. La mecánica estadística no puede determinar la historia de una partícula, pero sí puede proporcionar información de cuál es la probabilidad que tiene, en un instante cualquiera, de encontrarse en una posición dada y con un momentum determinado. Puesto que en el mundo físico muchos fenómenos suponen conjuntos de partículas, aparece claro el mayor valor de la estadística frente al determinismo. Debido a lo general de sus argumentos, la mecánica estadística se aplica con igual facilidad a los problemas clásicos (como el caso de las moléculas de un gas) que a los de la mecánica cuántica (electrones libres en un metal o fotones en una caja), y constituye una de las herramientas más poderosas de la física teórica.

9.1 LEY DE DISTRIBUCION ESTADISTICA

Aplicaremos ahora los métodos de la mecánica estadística para determinar cómo se distribuye una determinada cantidad total de energía entre los diversos miembros de un conjunto de partículas iguales; es decir, cuántas partículas pueden tener la energía ε_1, cuántas la energía ε_2, y así sucesivamente. Se considera que las partículas interactúan entre sí (o con las paredes de su recipiente) lo suficientemente como para establecer un equilibrio térmico en el conjunto, pero no para que dé por resultado cualquier correlación entre los movimientos de partículas individuales. Consideraremos conjuntos de tres tipos de partículas:

1. Partículas iguales de cualquier spin, lo suficientemente separadas como para poderse distinguir. Las moléculas de un gas son partículas de este tipo y se les aplica la *ley de distribución de Maxwell-Boltzmann*.

2. Partículas idénticas de spin cero o entero que no se pueden distinguir unas de otras. Estas partículas no obedecen el principio de exclusión, por lo que se les aplica la *ley de distribución de Bose-Einstein*. Los fotones son partículas de Bose, o *bosones*, y utilizaremos la ley de distribución de Bose-Einstein para explicar el espectro de radiación de un cuerpo opaco.

3. Partículas idénticas de spin $\frac{1}{2}$ que no se pueden distinguir unas de otras. Estas partículas obedecen al principio de exclusión y se adhieren a la *ley de distribución de Fermi-Dirac*. Los electrones son partículas de Fermi, o *fermiones*, y utilizaremos la distribución de Fermi-Dirac para explicar el comportamiento de electrones libres en un metal.

9.2 ESPACIO FASE

El estado de un sistema de partículas queda definido clásicamente, en un instante dado, si se conoce la posición y el momentum de cada partícula constituyente. Como la posición y el momentum son vectores con tres componentes cada uno, podemos conocer seis magnitudes para cada partícula,

$$x, y, z, p_x, p_y, p_z$$

La posición de una partícula es un punto en un espacio ordinario de tres dimensiones que tiene coordenadas x, y, z. Para generalizar este concepto, es conveniente considerar un espacio de seis dimensiones en el que un punto tiene las seis coordenadas x, y, z, p_x, p_y, p_z. Este espacio combinado de posición y momentum se conoce como *espacio fase*. La noción de espacio fase se presenta con el fin de poder desarrollar la mecánica estadística en un marco geométrico, con lo que se obtiene un método de análisis más simple y directo que el equivalente de carácter totalmente abstracto. Un punto en el espacio fase corresponde a una posición y a un momentum determinados, mientras que en el espacio ordinario supone solamente una posición. De este modo, cada partícula en el espacio fase queda definida por un punto, y el estado de un sistema de partículas corresponde a una distribución determinada de puntos en dicho espacio.

El principio de incertidumbre nos obliga a elaborar lo que para nosotros significa "un punto" en el espacio fase. Dividamos el espacio fase en celdillas de seis dimensiones cuyos lados sean $dx, dy, dz, dp_x, dp_y, dp_z$. Al reducir el tamaño de las celdillas, nos aproximamos cada vez más al límite de un punto del espacio fase. El volumen de cada una de estas celdillas es

$$\tau = dx\, dy\, dz\, dp_x\, dp_y\, dp_z$$

y de acuerdo con el principio de incertidumbre

$$dx\, dp_x \geqslant \hbar$$
$$dy\, dp_y \geqslant \hbar$$
$$dz\, dp_z \geqslant \hbar$$

por tanto,

$$\tau \geqslant \hbar^3$$

Un "punto" en el espacio fase es realmente una celda cuyo volumen mínimo es del orden de $\hbar^3$. Podemos pensar, por tanto, que una partícula en el espacio fase está localizada en algún lado de la celda centrada en x, y, z, p_x, p_y, p_z, en lugar de estar precisamente en el punto mismo.

Un análisis más detallado muestra que cada célula en espacio fase tiene en realidad el volumen h^3, lo que no contradice a los argumentos del principio de incertidumbre porque $h^3 > \hbar^3$. En general, toda celda en el espacio fase consta de k coordenadas y k momenta y ocupa un volumen de h^k. Corresponde a la mecánica estadística determinar el estado de un sistema investigando cómo las partículas que constituyen el sistema se distribuyen a sí mismas en celdas en el espacio fase.

La noción de un punto infinitesimal en el espacio fase puede no tener significado físico ya que viola el principio de incertidumbre. Solamente es aceptable si se considera por separado la posición en el espacio o el momentum: se puede, en principio, determinar la posición de una partícula con tanta exactitud como se desee aceptando una incertidumbre ilimitada en el conocimiento de su momentum y viceversa.

*9.3 DISTRIBUCION DE MAXWELL-BOLTZMANN

Consideremos un conjunto de N moléculas que tienen energías limitadas a los valores $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_i, \ldots$. Estas energías pueden representar estados discretos de energía, o bien, energías medias dentro de una secuencia de intervalos de energía y más de una celda en espacio fase puede corresponder a una energía dada. Lo que interesa conocer es la distribución más probable de moléculas entre las diferentes energías posibles.

Una premisa fundamental de la mecánica estadística es que cuanto mayor es el número W de maneras diferentes en que se pueden disponer las moléculas entre las celdas en espacio fase para dar una distribución particular de moléculas entre los diferentes niveles de energía, más probable es la distribución. La distribución más probable, por tanto, es aquella para la cual W es máximo. De aquí que nuestro primer paso sea determinar la expresión general de W. Consideramos que cada celda en espacio fase tiene la misma probabilidad de ser ocupada; esta suposición es posible, pero su justificación

www.elsolucionario.org

principal (como en el caso de la ecuación de Schrödinger) es que las conclusiones a las que se llegan por este método concuerdan con los resultados experimentales.

Si hay g_i celdas con la energía ε_i, el número de formas en que una molécula puede tener la energía ε_i es g_i. El número total de formas en que dos moléculas pueden tener la energía ε_i es g_i^2, y el número total de formas en que n_i moléculas pueden tener la energía ε_i es $(g_i)^{n_i}$. Así, el número de formas en que todas las moléculas N pueden ser distribuidas entre las diferentes energías es el producto de factores de la forma $(g_i)^{n_i}$, es decir,

9.1 $$(g_1)^{n_1}(g_2)^{n_2}(g_3)^{n_3}\dots$$

sujeto a la condición de que

9.2 $$\Sigma n_i = n_1 + n_2 + n_3 + \cdots = N$$

Sin embargo, la ecuación 9.1 es igual a W, ya que debemos considerar las permutaciones posibles de las moléculas entre los diferentes niveles de energía. El número total de permutaciones posibles para las N moléculas es $N!$; en otras palabras, las N moléculas se pueden distribuir de $N!$ formas diferentes. Si tenemos, por ejemplo, las cuatro moléculas a, b, c y d, el valor de 4! es

$$4! = 4 \times 3 \times 2 \times 1 = 24$$

y así las 24 maneras de distribuirlas son

abcd	*bacd*	*cabd*	*dabc*
abdc	*badc*	*cadb*	*dacb*
acbd	*bcad*	*cbad*	*dbac*
acdb	*bcda*	*cbda*	*dbca*
adbc	*bdac*	*cdab*	*dcab*
adcb	*bdca*	*cdba*	*dcba*

Cuando hay más de una molécula en un nivel de energía, la permutación entre ellas no tiene ningún significado en este caso. Por ejemplo, si ocurre que las moléculas a, b y c se encuentran en el nivel j, no importa que se las enumere *abc, acb, bca, bac, cab* o *cba*; estas seis distribuciones son equivalentes, porque lo único que nos interesa es el hecho de que $n_j = 3$. Así, las moléculas n_i en el i-ésimo nivel aportan $n_i!$ permutaciones impertinentes. Si hay n_1 moléculas en el nivel 1, n_2 moléculas en el nivel 2, y así sucesivamente, habrá $n_1!n_2!n_3!\dots$ permutaciones impertinentes. Lo que interesa es el número total de permutaciones posibles $N!$, dividido entre el número total de permutaciones impertinentes, o sea,

9.3 $$\frac{N!}{n_1!n_2!n_3!\dots}$$

El número total de formas en que se pueden distribuir N moléculas entre los niveles de energía posibles es el producto de las ecuaciones 9.1 y 9.3:

9.4 $$W = \frac{N!}{n_1!n_2!n_3!\dots}(g_1)^{n_1}(g_2)^{n_2}(g_3)^{n_3}\dots$$

Lo que se debe hacer ahora es determinar cuál es la distribución de moléculas más probable, esto es, qué distribución da el mayor valor de W. El primer paso es obtener una aproximación analítica adecuada para el factorial de un número grande. Observamos que, ya que

$$n! = n(n-1)(n-2)\dots(4)(3)(2)$$

el logaritmo natural de n! es

$$\ln n! = \ln 2 + \ln 3 + \ln 4 + \cdots + \ln(n-1) + \ln n$$

La Fig. 9-1 es una representación de $\ln n$ en función de n. El área bajo la curva escalonada es $\ln n!$. Cuando n es muy grande, la curva escalonada y la curva continua de $\ln n$ no se distinguen, por lo que determinamos $\ln n!$ integrando $\ln n$ desde $n = 1$ hasta $n = n$:

$$\ln n! = \int_1^n \ln n\, dn$$
$$= n \ln n - n + 1$$

Como suponemos que $n \gg 1$, podemos despreciar el 1 y obtenemos:

9.5 $$\ln n! = n \ln n - n \qquad n \gg 1$$ Fórmula de Stirling

Esta ecuación se conoce como *fórmula de Stirling*.

El logaritmo natural de la Ec. 9.4 es

$$\ln W = \ln N! - \Sigma \ln n_i! + \Sigma n_i \ln g_i$$

y, de acuerdo con la fórmula de Stirling, podemos escribir

$$\ln W = N \ln N - N - \Sigma n_i \ln n_i + \Sigma n_i + \Sigma n_i \ln g_i$$

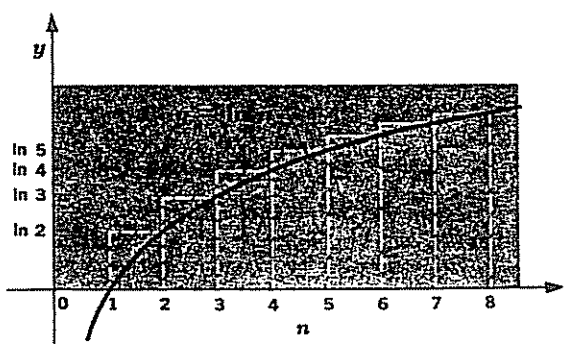


FIGURA 9-1 El área bajo la curva escalonada es $\ln n!$. Cuando n es muy grande, la curva lisa se acerca mucho a la curva escalonada, y se puede encontrar $\ln n!$ integrando $\ln n$ desde $n = 1$ hasta $n = n$.

Ya que $\Sigma\, n_i = N$,

9.6 $$\ln W = N \ln N - \Sigma\, n_i \ln n_i + \Sigma\, n_i \ln g_i$$

El tener una ecuación para ln W en lugar de para W no representa problema, ya que

$$(\ln W)_{\text{máx}} = \ln W_{\text{máx}}$$

La condición para que una distribución sea la más probable es que un cambio pequeño δn_i en cualquiera de los valores de n_i no altere el valor de W. (Si los valores de n_i variaran continuamente en lugar de estar limitados a valores enteros, esta condición se podría expresar como $\partial W/\partial n_i = 0$.) Si la variación de ln W correspondiente a un cambio δn_i en n_i es δ ln W, de acuerdo con la Ec. 9.6, tenemos que

9.7 $$\delta \ln W_{\text{máx}} = -\Sigma\, n_i \delta \ln n_i - \Sigma \ln n_i \delta n_i + \Sigma \ln g_i \delta n_i = 0$$

ya que N ln N es constante. Entonces,

$$\delta \ln n_i = \frac{1}{n_i}\delta n_i$$

y, por tanto,

$$\Sigma\, n_i \delta \ln n_i = \Sigma\, \delta n_i$$

Puesto que el número total de moléculas es constante, la suma $\Sigma\, \delta n_i$ de todos los cambios en el número de moléculas en cada nivel de energía debe ser 0. Esto significa que

$$\Sigma\, n_i \delta \ln n_i = 0$$

De aquí la Ec. 9.7 se transforma en:

9.8 $$-\Sigma \ln n_i \delta n_i + \Sigma \ln g_i \delta n_i = 0$$

No obstante que la distribución más probable de las moléculas debe cumplir la Ec. 9.8, ésta no especifica por sí misma esta distribución. Tenemos que considerar también la conservación de las partículas

(9.2) $$\Sigma n_i = n_1 + n_2 + n_3 + \cdots = N$$

y la conservación de energía

9.9 $$\Sigma n_i \varepsilon_i = n_1\varepsilon_1 + n_2\varepsilon_2 + n_3\varepsilon_3 + \cdots = E$$

donde E es la energía total del conjunto de moléculas. En consecuencia, las variaciones de $\delta n_1, \delta n_2, \ldots$ en el número de moléculas en cada nivel de energía, no son independientes entre sí, sino que deben obedecer las relaciones

9.10 $$\Sigma\, \delta n_i = \delta n_1 + \delta n_2 + \delta n_3 + \cdots = 0$$

9.11 $$\Sigma\, \varepsilon_i \delta n_i = \varepsilon_1 \delta n_1 + \varepsilon_2 \delta n_2 + \varepsilon_3 \delta n_3 + \cdots = 0$$

Para incorporar las condiciones anteriores sobre las diferentes δn_i en la Ec. 9.8, utilizamos el método de Lagrange de los multiplicadores indeterminados, que es simplemente un artificio matemático adecuado. Lo que hacemos es multiplicar la Ec. 9.10 por $-\alpha$ y la Ec. 9.11 por $-\beta$, donde α y β son cantidades independientes de n_i, y sumamos estas expresiones a la Ec. 9.8. Obtenemos

9.12 $$\Sigma(-\ln n_i + \ln g_i - \alpha - \beta\varepsilon_i)\delta n_i = 0$$

En cada una de las ecuaciones separadas sumadas para obtener la Ec. 9.12, la variación δn_i es realmente una variable independiente. Para que la Ec. 9.12 sea válida, la cantidad entre paréntesis debe ser cero para cada valor de i. Así

$$-\ln n_i + \ln g_i - \alpha - \beta\varepsilon_i = 0$$

de la que obtenemos la ley de distribución de Maxwell-Boltzmann

9.13 $$n_i = g_i e^{-\alpha} e^{-\beta\varepsilon_i}$$

Ley de distribución de Maxwell-Boltzmann

Esta fórmula proporciona el número de moléculas n_i que tiene la energía ε_i en función del número de células en espacio fase g_i que tiene la energía ε_i y de las constantes α y β. Vamos ahora a calcular g_i, α, y β.

*9.4 EVALUACION DE CONSTANTES

La cuantización de la energía no es evidente en el movimiento de traslación de las moléculas en un gas, y el número total de moléculas en una muestra generalmente es muy grande. Por tanto, es más conveniente considerar una distribución continua de energías moleculares, en lugar de los conjuntos aislados $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \ldots$. Si $n(\varepsilon)\, d\varepsilon$ es el número de moléculas que tienen energías comprendidas entre ε y $\varepsilon + d\varepsilon$, la Ec. 9.3 queda

9.14 $$n(\varepsilon)\, d\varepsilon = g(\varepsilon) e^{-\alpha} e^{-\beta\varepsilon}\, d\varepsilon$$

En términos del momentum molecular, puesto que

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$$

tenemos

9.15 $$n(p)\, dp = g(p) e^{-\alpha} e^{-\beta p^2/2m}\, dp$$

La cantidad $g(p)$ es igual al número de celdas en espacio fase en el que una molécula tiene un momentum entre p y $p + dp$. Como cada celda tiene el volumen h^3,

$$g(p)\,dp = \frac{\iiint\iint dx\,dy\,dz\,dp_x\,dp_y\,dp_z}{h^3}$$

donde el numerador es el volumen de espacio fase que está ocupado por partículas con los momenta especificados. Por tanto,

$$\iiint dx\,dy\,dz = V$$

donde V es el volumen que está ocupado por el gas en coordenadas geométricas de posición y

$$\iint dp_x\,dp_y\,dp_z = 4\pi p^2\,dp$$

donde $4\pi p^2\,dp$ es el volumen de una esfera de radio p y espesor dp en las coordenadas de momentum. Por tanto,

9.16 $$g(p)\,dp = \frac{4\pi V p^2\,dp}{h^3}$$

y

9.17 $$n(p)\,dp = \frac{4\pi V p^2 e^{-\alpha} e^{-\beta p^2/2m}}{h^3}\,dp$$

Ahora ya es posible hallar el valor de $e^{-\alpha}$. Puesto que

$$\int_0^\infty n(p)\,dp = N$$

integrando la Ec. 9.17, encontramos que

$$N = \frac{4\pi e^{-\alpha} V}{h^3}\int_0^\infty p^2 e^{-\beta p^2/2m}\,dp$$
$$= \frac{e^{-\alpha} V}{h^3}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2}$$

donde utilizamos la integral definida

$$\int_0^\infty x^2 e^{-ax^2}\,dx = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$$

Por tanto,

$$e^{-\alpha} = \frac{Nh^3}{V}\left(\frac{\beta}{2\pi m}\right)^{3/2}$$

y

9.18 $$n(p)\,dp = 4\pi N\left(\frac{\beta}{2\pi m}\right)^{3/2} p^2 e^{-\beta p^2/2m}\,dp$$

Para hallar β, hay que calcular la energía total E del conjunto de moléculas. Puesto que

$$p^2 = 2m\varepsilon \qquad \text{y} \qquad dp = \frac{m\,d\varepsilon}{\sqrt{2m\varepsilon}}$$

la Ec. 9.18 se puede escribir en la forma:

9.19 $$n(\varepsilon)\,d\varepsilon = \frac{2N\beta^{3/2}}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\varepsilon}\,e^{-\beta\varepsilon}\,d\varepsilon$$

La energía total es

$$E = \int_0^\infty \varepsilon n(\varepsilon)\,d\varepsilon$$
$$= \frac{2N\beta^{3/2}}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \varepsilon^{3/2} e^{-\beta\varepsilon}\,d\varepsilon$$

9.20 $$= \frac{3}{2}\frac{N}{\beta}$$

donde utilizamos la integral definida

$$\int_0^\infty x^{3/2} e^{-ax}\,dx = \frac{3}{4a^2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

De acuerdo con la teoría cinética de los gases, la energía total E de las N moléculas de un gas ideal (que es nuestro caso) a la temperatura absoluta T es:

9.21 $$E = \frac{3}{2}NkT$$

donde k es la constante de Boltzmann

$$k = 1.380 \times 10^{-23}\ \text{J/molécula-grado}$$

Las Ecs. 9.20 y 9.21 concuerdan si

9.22 $$\beta = \frac{1}{kT}$$

9.5 ENERGIAS MOLECULARES EN UN GAS IDEAL

Una vez determinados los parámetros α y β, la ley de distribución de Boltzmann se puede escribir en su forma definitiva

9.23 $$n(\varepsilon)\,d\varepsilon = \frac{2\pi N}{(\pi kT)^{3/2}}\sqrt{\varepsilon}\,e^{-\varepsilon/kT}\,d\varepsilon$$

Distribución de energía Boltzmann

Esta ecuación da el número de moléculas que poseen energías entre ε y $\varepsilon + d\varepsilon$ en una muestra de un gas ideal que contenga un número total de N moléculas y cuya temperatura absoluta sea T. La distribución de energía de Boltzmann se representa en la Fig. 9-2 en función de kT. La curva no es simétrica porque el límite inferior de ε es $\varepsilon = 0$ mientras que en principio no existe límite superior

www.elsolucionario.org

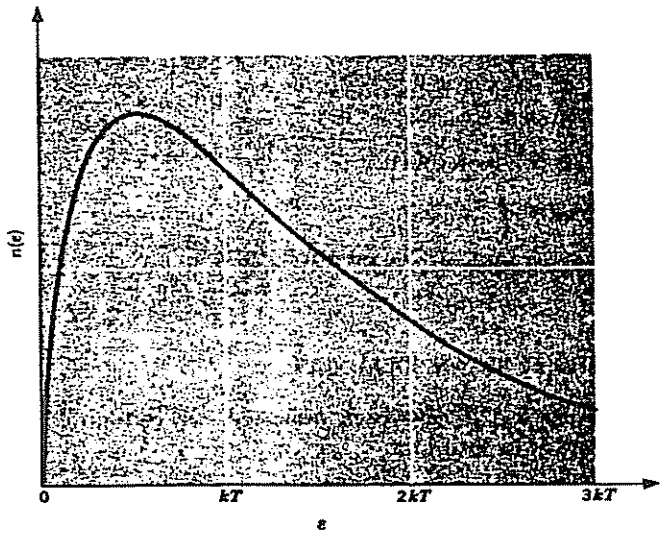


FIGURA 9-2 Distribución de energía de Maxwell-Boltzmann.

(aunque la probabilidad de energía varias veces superiores a kT es pequeña).

De acuerdo con la Ec. 9.20, la energía total E de un conjunto de N moléculas es

$$E = \frac{3}{2}\frac{N}{\beta}$$

La *energía promedio* $\bar{\varepsilon}$ por molécula es E/N, de manera que

$$\bar{\varepsilon} = \frac{3}{2}\frac{1}{\beta}$$

9.24 $$= \frac{3}{2}kT$$ Energía molecular promedio

A 300° K, que es aproximadamente la temperatura ambiente,

$$\bar{\varepsilon} = 6.21 \times 10^{-21}\ \text{J/molécula}$$
$$\approx \tfrac{1}{25}\ \text{eV/molécula}$$

Esta energía promedio es la misma para todas las moléculas a 300° K, independientemente de su masa. Las distribuciones de momento y velocidades moleculares de Boltzmann se pueden obtener a partir de la Ec. 9.23 si observamos que

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2}mv^2$$

$$d\varepsilon = \frac{p}{m}dp = mv\,dv$$

Encontramos que

9.25 $$n(p)\,dp = \frac{\sqrt{2}\pi N}{(\pi mkT)^{3/2}}p^2 e^{-p^2/2mkT}\,dp$$ Distribución de momenta de Boltzmann

que es el número de moléculas que tienen momenta comprendidos entre p y $p + dp$, y

9.26 $$n(v)\,dv = \frac{\sqrt{2}\pi N m^{3/2}}{(\pi kT)^{3/2}}v^2 e^{-mv^2/2kT}\,dv$$ Distribución de velocidades de Boltzmann

es el número de moléculas que tienen velocidades entre v y $v + dv$. Esta última fórmula, representada en la Fig. 9-3, fue obtenida por primera vez por Maxwell en 1859.

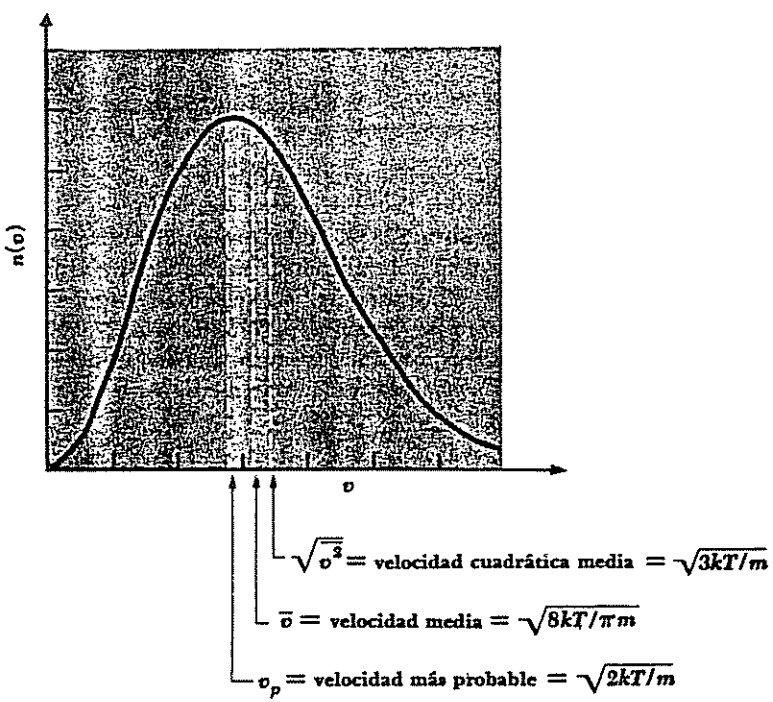


FIGURA 9-3 Distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann.

La velocidad de una molécula con energía promedio de $\frac{3}{2}kT$ es

9.27 $$v_{rcm} = \sqrt{\overline{v^2}} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}$$ Velocidad Rcm

ya que $\overline{\frac{1}{2}mv^2} = \frac{3}{2}kT$. Esta velocidad se denomina v_{rcm} debido a que es la raíz cuadrada del promedio de las velocidades moleculares al cuadrado (la velocidad *raíz cuadrática media*) y es diferente del promedio aritmético sencillo de la velocidad $\bar{v}$. La relación entre $\bar{v}$ y v_{rcm} depende de la ley de distribución, que gobierna a las velocidades moleculares que se estén considerando. Para una distribución de Boltzmann,

$$v_{rcm} = \sqrt{\frac{3\pi}{8}}\bar{v} \simeq 1.09\bar{v}$$

de manera que la velocidad rcm es aproximadamente 9% mayor que la velocidad media aritmética.

Debido a que la distribución de Boltzmann de velocidades no es simétrica, la velocidad más probable v_p es menor que $\bar{v}$ y que v_{rcm}. Para encontrar v_p, igualamos a cero la derivada de $n(v)$ con respecto a v y resolvemos la ecuación resultante para v. Obtenemos

9.28 $$v_p = \sqrt{\frac{2kT}{m}}$$ Velocidad más probable

Las velocidades moleculares en un gas varían considerablemente a cada lado de v_p. La Fig. 9-4 muestra la distribución de velocidades moleculares en el oxígeno a 73°K (-200°C), en el oxígeno a 273°K (0°C), y en el hidrógeno a 273°K. La velocidad molecular más probable aumenta con la temperatura y disminuye con la masa molecular. En consecuencia, las velocidades moleculares en el oxígeno a 73°K son, en conjunto, menores a 273°K, y a 273°K las velocidades moleculares en el hidrógeno son, en conjunto, mayores que en el oxígeno a la misma temperatura. (La *energía* molecular media es igual en el hidrógeno y en el oxígeno a 273°K.)

9.6 ESPECTROS DE ROTACION

Una distribución continua de energía se presenta únicamente en movimientos de traslación de moléculas. Como vimos en el Cap. 8, las rotaciones y vibraciones moleculares están cuantizadas, siendo posibles únicamente ciertas energías específicas E_i. La ley de distribución de Boltzmann para modos de energía del último tipo se puede escribir como

9.29 $$n_i = n_0 g_i e^{-E_i/kT}$$

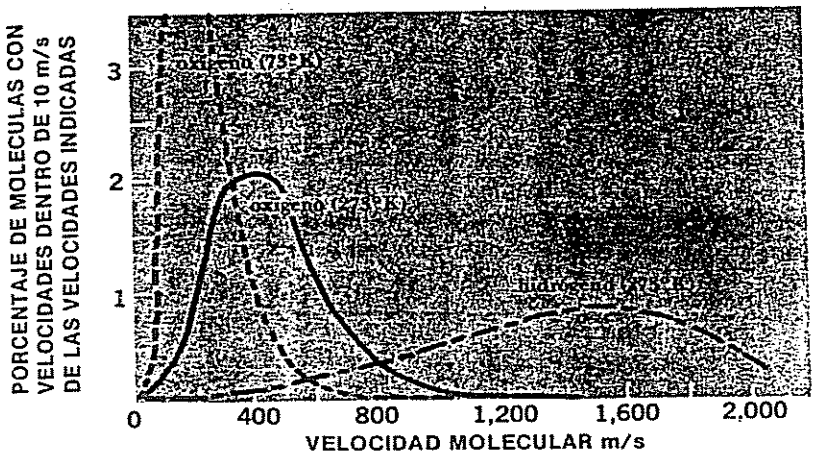


FIGURA 9-4 Distribución de velocidades moleculares en el oxígeno a 73°K, en el oxígeno a 273°K y en el hidrógeno a 273°K.

que es la Ec. 9.13 en la que se sustituyó $e^{-\alpha}$ por n_0 y E_i/kT por βu_i. El factor $e^{-E_i/kT}$, llamado con frecuencia *factor de Boltzmann*, expresa la probabilidad relativa de que un estado cuántico de energía E_i sea ocupado a la temperatura T. El factor g_i, la multiplicidad (o peso estadístico) del nivel, es el número de estados cuánticos que tienen la misma energía E_i.

Apliquemos la Ec. 9.29 a los niveles de energía de rotación de una molécula. (Las poblaciones relativas de niveles de energía atómica se pueden tratar de la misma manera.) Como sabemos, más de un estado de rotación puede corresponder a un número cuántico de rotación particular J. La degeneración surge porque la componente L_z en cualquier dirección que se especifique del momentum angular **L** puede tener cualquier valor en múltiplos de $\hbar$ desde $J\hbar$ hasta $-J\hbar$, pasando por cero, para un total de $2J + 1$ valores posibles. Esto es, existen $2J + 1$ orientaciones posibles de **L** con relación a la dirección especifica (z). Cada una de estas orientaciones constituye un estado cuántico separado. Así, un nivel de energía cuyo número cuántico de rotación sea J tiene un peso estadístico de

$$g_J = 2J + 1$$

Para una molécula diatómica rígida,

$$E_J = J(J + 1)\frac{\hbar^2}{2I}$$

y así, el factor de Boltzmann correspondiente al número cuántico J es

$$e^{-J(J+1)\hbar^2/2IkT}$$

La fórmula de distribución de Boltzmann para las probabilidades de ocupación de los niveles de energía de rotación de una molécula diatómica rígida es, por tanto,

$$n_J = (2J + 1)\, n_0\, e^{-J(J+1)\hbar^2/2IkT} \tag{9.30}$$

Aquí la cantidad n_0 es el número de moléculas en el estado de rotación $J = 0$.

En la Sec. 8.8, encontramos que el momento de inercia de la molécula de CO es 1.46×10^{-46} kg-m^2. Para una muestra del gas monóxido de carbono, a la temperatura ambiente (293°K, que equivalen a 20°C)

$$\frac{\hbar^2}{2IkT} = \frac{(1.054 \times 10^{-34}\ \text{J-s})^2}{2 \times 1.46 \times 10^{-46}\ \text{kg-m}^2 \times 1.38 \times 10^{-23}\ \text{J/K} \times 293\ \text{K}} = 0.00941$$

y así

$$n_J = (2J + 1)\, n_0\, e^{-0.00941\,J(J+1)}$$

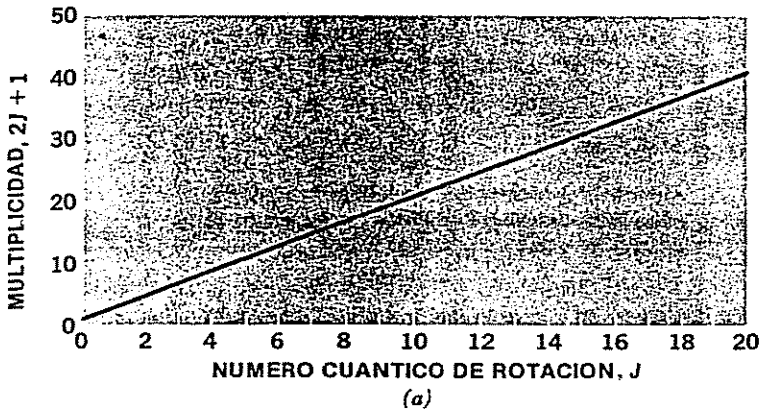
La Fig. 9-5 contiene gráficas del peso estadístico $2J + 1$, el factor Boltzmann $e^{-0.00941\,J(J+1)}$, y la población relativa n_J/n_0 para CO a 20°C, todos ellos en función de J. El nivel de energía de rotación $J = 7$ es evidentemente el más poblado, y casi se encuentran tantas moléculas en una muestra de CO a temperatura ambiente en el nivel $J = 19$ como en el nivel $J = 0$.

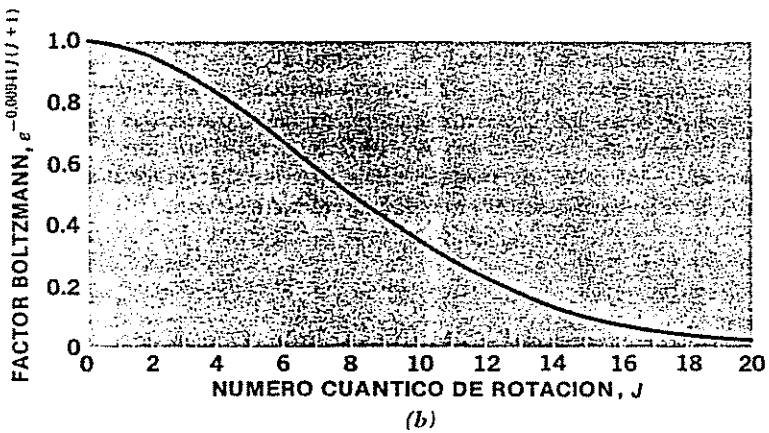
Las intensidades de la línea de rotación en un espectro molecular son proporcionales a las poblaciones relativas de los diferentes niveles de energía de rotación. La Fig. 8-27 muestra la banda de vibración-rotación del CO para la transición de vibración $v = 0 \rightarrow v = 1$ bajo alta resolución; las líneas se identifican de acuerdo con el valor J del nivel de rotación inicial. Las ramas P y R tienen ambas su máximo en $J = 7$, como era de esperarse.

*9.7 DISTRIBUCION DE BOSE-EINSTEIN

La diferencia fundamental entre la estadística de Maxwell-Boltzmann y la de Bose-Einstein está en que la primera se aplica a partículas idénticas que se pueden distinguir unas de otras de alguna manera, mientras que la última es aplicable a partículas que no se pueden distinguir. En la estadística de Bose-Einstein, se supone que todos los estados cuánticos tienen la misma probabilidad de ocupación, de modo que g_i representa el número de estados que tienen la misma energía ε_i. Cada estado cuántico corresponde a una celda en espacio fase, de modo que el primer paso será determinar el número de las diferentes maneras como pueden distribuirse en n_i celdas las g_i partículas indistinguibles.

Para ello, consideremos una serie de $n_i + g_i - 1$ objetos colocados en línea (Fig. 9-6). Vemos que $g_i - 1$ objetos se pueden considerar como elementos de división que separan un total de g_i intervalos, representando la serie entera





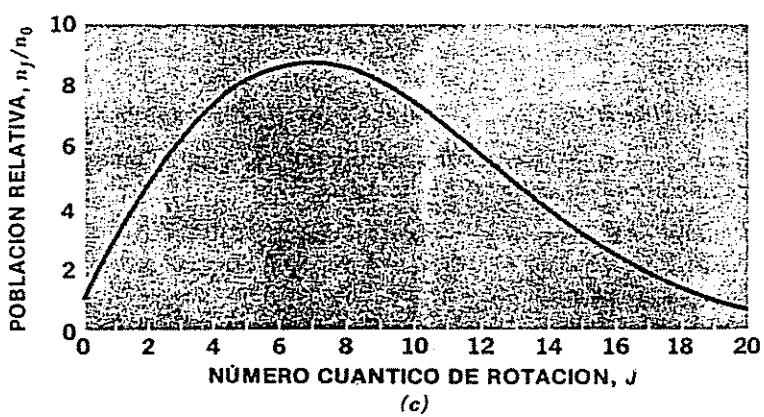
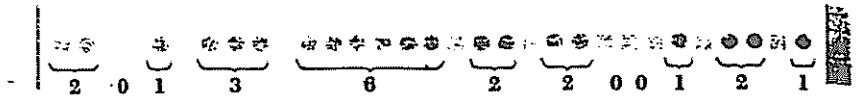


FIGURA 9-5 Multiplicidades *a*), factores Boltzmann *b*) y poblaciones relativas *c*) de los niveles de energía de rotación de la molécula de CO a 20°C.

www.elsolucionario.org



partícula
elemento de división

número de partículas indistinguibles $= n_i = 20$
número de elementos de división $= g_i - 1 = 11$
número de celdas $= g_i = 12$

FIGURA 9-6 Serie de n_i partículas indistinguibles separadas por $g_i - 1$ elementos de división en g_i celdas.

n_i partículas distribuidas en g_i celdas. En la figura, tenemos que $g_i = 12$ y $n_i = 20$; 11 elementos de división separan las 20 partículas en 12 celdas. La primera celda contiene dos partículas; la segunda, ninguna; la tercera, una; la cuarta, tres, etc. Hay $(n_i + g_i - 1)!$ permutaciones posibles entre $n_i + g_i - 1$ objetos, pero de éstas las $n_i!$ permutaciones de las n_i partículas y las $(g_i - 1)!$ de los $g_i - 1$ elementos de división no afectan la distribución y, por tanto, no tienen sentido. Así pues, es posible distinguir las diferentes distribuciones de las n_i partículas indistinguibles entre las g_i celdas que son:

$$\frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i!(g_i - 1)!}$$

La probabilidad W de la distribución total de N partículas es el producto de las diferentes distribuciones de partículas entre los estados de cada energía

9.31 $$W = \Pi \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i!(g_i - 1)!}$$

Suponemos que

$$(n_i + g_i) \gg 1$$

de modo que $(n_i + g_i - 1)$ se puede sustituir por $(n_i + g_i)$. Tomando logaritmos en ambos miembros de la Ec. 9.31, tenemos

$$\ln W = \Sigma [\ln (n_i + g_i)! - \ln n_i! - \ln (g_i - 1)!]$$

La fórmula de Stirling

$$\ln n! = n \ln n - n$$

nos permite escribir ln W de la siguiente forma

9.32 $$\ln W = \Sigma [(n_i + g_i) \ln (n_i + g_i) - n_i \ln n_i - \ln (g_i - 1)! - g_i]$$

Como lo vimos anteriormente, la condición para que esta distribución sea la más probable, es que variaciones pequeñas de δn_i en cualquiera de los n_i valores individuales no altere el valor de W. Si varía ln W en δ ln W al variar n_i en δn_i, la condición anterior se puede escribir como

$$\delta \ln W_{máx} = 0$$

Por tanto, si W en la Ec. 9.32 representa un máximo,

9.33 $$\delta \ln W_{máx} = \Sigma [\ln (n_i + g_i) - \ln n_i] \delta n_i = 0$$

donde utilizamos el hecho de que

$$\delta \ln n = \frac{1}{n} \delta n$$

Como en la Sec. 9.3, incorporamos la conservación de partículas expresada en la forma

$$\Sigma \delta n_i = 0$$

y de la conservación de la energía, expresada en la forma

$$\Sigma \varepsilon_i \delta n_i = 0$$

multiplicando la primera ecuación por $-\alpha$, y la segunda por $-\beta$, y sumándolas a la Ec. 9.33, el resultado es

$$\Sigma [\ln (n_i + g_i) - \ln n_i - \alpha - \beta\varepsilon_i] \delta n_i = 0$$

Puesto que las δn_i son independientes, el término entre corchetes se debe anular para cada valor de i. Por tanto,

$$\ln \frac{n_i + g_i}{n_i} - \alpha - \beta\varepsilon_i = 0$$

$$1 + \frac{g_i}{n_i} = e^{\alpha} e^{\beta\varepsilon_i}$$

y

9.34 $$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha} e^{\beta\varepsilon_i} - 1}$$

Sustituyendo β de la Ec. 9.22

(9.22) $$\beta = \frac{1}{kT}$$

se obtiene la *ley de distribución de Bose-Einstein*.

Ley de distribución de Bose-Einstein

9.35 $$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha} e^{\varepsilon_i / kT} - 1}$$

9.8 RADIACION DE CUERPO NEGRO

Toda sustancia emite radiación electromagnética, cuyas características dependen de la naturaleza y temperatura de la sustancia. Ya estudiamos los espectros discretos de gases excitados que se producen a partir de transiciones electrónicas dentro de átomos aislados. Por otro lado, cuerpos más densos, como es el caso de los sólidos, dan lugar a espectros continuos, en los que están presentes todas las frecuencias. Los átomos en un cuerpo sólido están tan próximos unos de otros que sus interacciones mutuas dan lugar a una gran cantidad de estados cuánticos indistinguibles, produciendo una banda continua de energías permitidas.

La facultad de un cuerpo para emitir radiación está estrechamente relacionada con su capacidad para absorberla. Esto es de esperar, ya que un cuerpo a temperatura constante está en equilibrio térmico con su ambiente y debe absorber energía en la misma proporción que la emite. A este respecto, es conveniente considerar como cuerpo ideal aquel que absorbe *toda* la radiación que sobre él incide, independientemente de la frecuencia de que se trate. Un cuerpo que tenga estas propiedades recibe el nombre de *cuerpo negro.*

Es fácil demostrar experimentalmente que el cuerpo negro es mejor emisor de radiación que cualquier otro. El experimento, Fig. 9-7, implica la existencia de dos pares idénticos de superficies distintas. La temperatura de las superficies I' y II' es la misma. A una temperatura dada, las superficies I y I' radian e_1 W/m^2, mientras que las II y II' radian e_2. Las superficies I y I' absorben la fracción a_1 de la radiación que incide sobre ellas, mientras que las II y II' absorben otra fracción a_2. Por tanto I' absorbe energía de II proporcionalmente a a_2e_1. Puesto que I' y II' permanecen a la misma temperatur. se debe cumplir que

$$a_1e_2 = a_2e_1$$

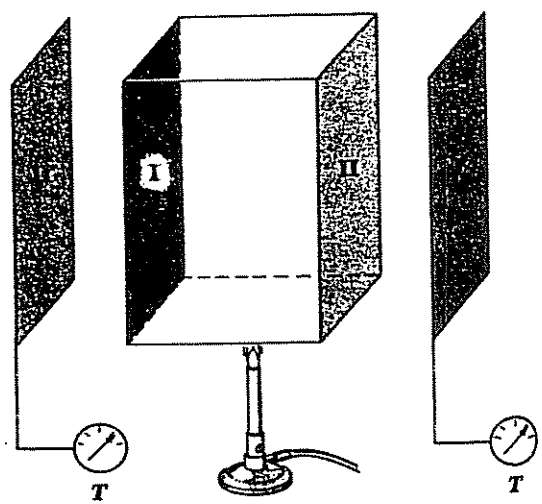


FIGURA 9-7 Las superficies I e I' son idénticas entre sí y diferentes de la pareja idéntica II e II

y

$$\frac{e_1}{a_1} = \frac{e_2}{a_2}$$

La capacidad de emisión de radiación de un cuerpo es proporcional a su capacidad de absorción. Supongamos que I y I' son cuerpos negros, de modo que $a_1 = 1$, mientras que II y II' no lo son, de manera que $a_2 < 1$. Entonces

$$e_1 = \frac{e_2}{a_2}$$

y, puesto que $a_2 < 1$, $e_1 > e_2$. Un cuerpo negro, a una temperatura dada, emite energía en mayor proporción que cualquier otro.

Lo interesante de introducir un cuerpo negro ideal en el estudio de la radiación térmica está en que, con él, se puede prescindir de la naturaleza exacta de la misma, ya que todos los cuerpos negros se comportan idénticamente. Una buena aproximación del cuerpo negro, en el laboratorio, consiste en un objeto hueco con un orificio muy pequeño (Fig. 9-8). Toda radiación que incide en el orificio, entra a la cavidad y es atrapada por reflexiones de las paredes hasta ser absorbida. Las paredes de la cavidad emiten y absorben constantemente radiación. Nuestro interés consiste en las propiedades de esta radiación. Experimentalmente, podemos tomar muestra de la radiación del cuerpo negro mediante la observación simple de lo que sale del orificio. Los resultados concuerdan con nuestra experiencia diaria; un cuerpo emite más cuando está caliente que cuando está frío, y el espectro de un cuerpo caliente tiene un pico a una frecuencia más elevada que el pico del espectro del cuerpo más frío. Estos hechos concuerdan con el comportamiento de una barra de hierro que se calienta paulatinamente: al principio, su color es rojo oscuro, después, rojo anaranjado y, finalmente, blanco. El espectro de radiación del cuerpo negro aparece en la Fig. 9-9, para dos temperaturas.

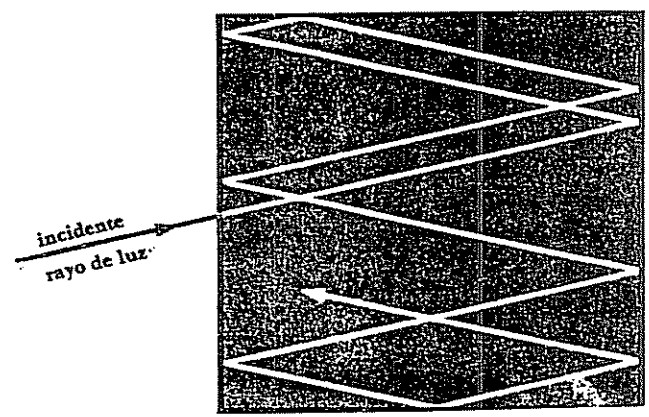


FIGURA 9-8 Un agujero en la pared de un objeto hueco es una excelente aproximación del cuerpo negro.

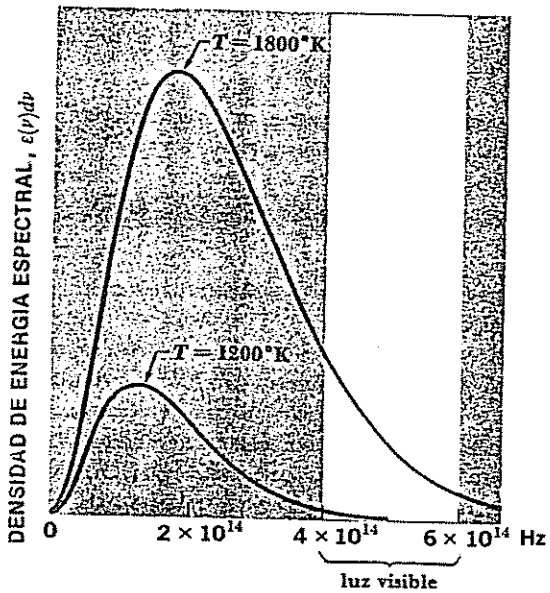


FIGURA 9-9 Espectros del cuerpo negro. La distribución espectral de la energía en la radiación depende únicamente de la temperatura del cuerpo.

Los principios de la física clásica son incapaces de explicar el espectro observado del cuerpo negro. De hecho, esta fue la causa que condujo a Max Planck, en 1900, a sugerir que la luz es un fenómeno cuántico. Utilizando la mecánica cuántico-estadística, se obtiene la fórmula de radiación de Planck que predice el espectro hallado experimentalmente.

Nuestra versión teórica del modelo de cuerpo negro será la misma que la de laboratorio; esto es, una cavidad de un material opaco. La cavidad tiene un volumen V, y contiene una gran cantidad de fotones indistinguibles de distintas frecuencias. Los fotones no obedecen al principio de exclusión, de modo que se comportan como partículas de Bose que cumplen la ley de distribución de Bose-Einstein. El número de estados $g(p)$ en los que un fotón puede tener un momentum comprendido entre p y $p + dp$ es igual al doble del número de celdas del espacio fase en el que puede existir dicho fotón. La razón de la posible ocupación doble de cada celda se debe a que los fotones de la misma frecuencia pueden tener dos direcciones diferentes de polarización (en el sentido de las agujas del reloj y en el sentido contrario). Por tanto, utilizando el mismo argumento que dio lugar a la Ec. 9.16, tenemos:

$$g(p)\,dp = \frac{8\pi V p^2\,dp}{h^3}$$

Puesto que el momentum de un fotón es $p = h\nu/c$,

$$p^2\,dp = \frac{h^3\nu^2\,d\nu}{c^3}$$

y

$$g(\nu)\,d\nu = \frac{8\pi V}{c^3}\nu^2\,d\nu \tag{9.36}$$

Debemos calcular ahora el multiplicador α de Lagrange de la Ec. 9.35. Antes de hacerlo, consideremos que el número de fotones en la cavidad no es necesario que se conserve. A diferencia de las moléculas gaseosas y los electrones, los fotones se pueden crear y destruir de modo que, aunque la energía radiante total dentro de la cavidad debe permanecer constante, el número de fotones que incorporan esta energía puede variar. Por ejemplo, dos fotones de energía $h\nu$ pueden ser emitidos simultáneamente por la absorción de un único fotón de energía $2h\nu$. Por tanto,

$$\Sigma\,\delta n_i \neq 0$$

lo que se puede expresar estableciendo que $\alpha = 0$, ya que multiplica a $\Sigma\,\delta n_i = 0$.

Sustituyendo la Ec. 9.36 por g_i y $h\nu$ por ε_i, y admitiendo que $\alpha = 0$ en la ley de distribución de Bose-Einstein (Ec. 9.35), se encuentra que el número de fotones con frecuencias comprendidas entre ν y $\nu + d\nu$ en la radiación dentro de una cavidad de volumen V, cuyas paredes están a la temperatura absoluta T, es

$$n(\nu)\,d\nu = \frac{8\pi V}{c^3}\frac{\nu^2\,d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \tag{9.37}$$

La densidad de energía espectral correspondiente $\varepsilon(\nu)\,d\nu$, que es la energía por unidad de volumen de la radiación comprendida entre las frecuencias ν y $\nu + d\nu$, viene dada por

$$\varepsilon(\nu)\,d\nu = \frac{h\nu n(\nu)\,d\nu}{V}$$

$$= \frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^2\,d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \tag{9.38}$$

Fórmula de radiación de Planck

Esta ecuación es la *fórmula de radiación de Planck* que está de acuerdo con los resultados experimentales.

Dos conclusiones interesantes se pueden deducir de esta fórmula. Para hallar la longitud de onda que tenga mayor densidad de energía, expresamos la Ec. 8.38 en función de la longitud de onda y establecemos

$$\frac{d\varepsilon(\lambda)}{d\lambda} = 0$$

y la resolvemos para $\lambda = \lambda_{máx}$. Obtenemos así

$$\frac{hc}{kT\lambda_{máx}} = 4.965$$

www.elsolucionario.org

que se expresa mejor como

$$\lambda_{máx} T = \frac{hc}{4.965k}$$

9.39 $$= 2.898 \times 10^{-3} \text{ m K}$$

La Ec. 9.39 se conoce como *ley de desplazamiento de Wien*. Expresa cuantitativamente el hecho empírico de que el pico en el espectro del cuerpo negro se desplaza progresivamente hacia longitudes de onda más cortas (frecuencias más elevadas) al aumentar la temperatura.

El otro resultado que se puede obtener de la Ec. 9.38 es la densidad de energía total ε dentro de la cavidad. Esta es la integral de la densidad de energía para todas las frecuencias:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \int_0^\infty \varepsilon(\nu)\, d\nu \\ &= \frac{8\pi^5 k^4}{15c^3h^3} T^4 \\ &= aT^4 \end{aligned}$$

donde a es una constante universal. La energía total es proporcional a la cuarta potencia de la temperatura absoluta de la pared. Se puede esperar, por tanto, que la energía radiada e por un cuerpo negro por unidad de área y por segundo sea también proporcional a T^4. Esta conclusión está incorporada en la *ley de Stefan-Boltzmann*:

9.40 $$e = \sigma T^4$$

El valor de la constante de Stefan σ es

$$\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2 \text{ K}^4$$

Tanto la ley de desplazamiento de Wien como la de Stefan-Boltzmann aparecen de un modo cualitativo en la Fig. 9-9; el máximo de las curvas se desplaza hacia frecuencias más altas, y el área total bajo ellas aumenta rápidamente al elevarse la temperatura.

*9.9 DISTRIBUCION DE FERMI-DIRAC

La estadística de Fermi-Dirac se aplica a partículas indistinguibles que cumplen el principio de exclusión. La deducción de la ley de distribución de Fermi-Dirac es análoga a la de Bose-Einstein, sólo que ahora cada celda (cada estado cuántico) puede estar ocupado como máximo por una partícula.

Si hay g_i celdas que tienen la misma energía ε_i y n_i partículas, hay n_i celdas llenas y $(g_i - n_i)$ están vacías. Las g_i celdas se pueden agrupar de g_i maneras distintas, pero las permutaciones $n_i!$ de las celdas llenas entre sí carecen de

sentido, ya que las partículas son indistinguibles, y las permutaciones $(g_i - n_i)!$ de las celdas vacías tampoco tienen sentido, puesto que las celdas no están ocupadas. El número de agrupaciones distinguibles de partículas entre celdas es, por tanto,

$$\frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!}$$

La probabilidad W de la distribución total de partículas es el producto

9.41 $$W = \Pi \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!}$$

Tomando los logaritmos naturales en ambos miembros,

$$\ln W = \Sigma \left[\ln g_i! - \ln n_i! - \ln (g_i - n_i)!\right]$$

con la fórmula de Stirling

$$\ln n! = n \ln n - n$$

nos permite escribirla como

9.42 $$\ln W = \Sigma \left[g_i \ln g_i - n_i \ln n_i - (g_i - n_i) \ln (g_i - n_i)\right]$$

Para que esta distribución represente la máxima probabilidad, se tiene que cumplir que pequeñas variaciones δn_i en cualquiera de los n_i valores individuales no altere el valor de W. Por tanto

9.43 $$\delta \ln W_{máx} = \Sigma \left[-\ln n_i + \ln (g_i - n_i)\right] \delta n_i = 0$$

Como anteriormente, tenemos en cuenta la conservación del número de partículas y de la energía al sumar

$$-\alpha \Sigma\, \delta n_i = 0$$

y

$$-\beta \Sigma\, \varepsilon_i \delta n_i = 0$$

a la Ec. 9.43, con el resultado de que

9.44 $$\Sigma \left[-\ln n_i + \ln (g_i - n_i) - \alpha - \beta \varepsilon_i\right] \delta n_i = 0$$

Puesto que los δn_i son independientes, la cantidad entre paréntesis se debe anular para cada valor de i, por tanto,

$$\ln \frac{g_i - n_i}{n_i} - \alpha - \beta \varepsilon_i = 0$$

$$\frac{g}{n_i} - 1 = e^{\alpha} e^{\beta \varepsilon}$$

9.45 $$n_i = \frac{g}{e\, e^{\beta \varepsilon_i} + 1}$$

Sustituyendo

$$\beta = \frac{1}{kT}$$

resulta la *ley de distribución de Fermi-Dirac*

9.46 $$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha} e^{\varepsilon_i/kT} + 1}$$ Ley de distribución de Fermi-Dirac

La aplicación más importante de la ley de distribución de Fermi-Dirac está en la teoría del electron libre de los metales, que será tratada en el próximo capítulo.

9.10 COMPARACION DE RESULTADOS

Las tres leyes de distribución estadística son las siguientes:

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha} e^{\varepsilon_i/kT}}$$ Maxwell-Boltzmann

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha} e^{\varepsilon_i/kT} - 1}$$ Bose-Einstein

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha} e^{\varepsilon_i/kT} + 1}$$ Fermi-Dirac

En estas fórmulas, n_i es el número de partículas cuya energía es ε_i y g_i es el número de estados con la misma energía ε_i. El término

9.47 $$f(\varepsilon_i) = \frac{n_i}{g_i},$$ Indice de ocupación

llamado *índice de ocupación* de un estado de energía ε_i, es, por tanto, el número medio de partículas en cada uno de los estados de dicha energía. El índice de ocupación no depende de cómo estén distribuidos los niveles de energía de un sistema de partículas, y por ello proporciona un medio adecuado para comparar las tres leyes de distribución.

El índice de ocupación de Maxwell-Boltzmann es exponencial puro, cae mediante el factor $1/e$ para cada incremento en ε_i de kT. Mientras que $f(\varepsilon_i)$ depende del parámetro α, la *razón* entre los índices de ocupación $f(\varepsilon_i)$ y $f(\varepsilon_j)$ de los dos niveles de energía ε_i y ε_j no depende de aquél;

9.48 $$\frac{f(\varepsilon_i)}{f(\varepsilon_j)} = e^{(\varepsilon_j - \varepsilon_i)/kT}$$ Factor de Boltzmann

Esta fórmula es útil porque cuando $f(\varepsilon) \ll 1$, las distribuciones de Bose-Einstein y de Fermi-Dirac se asemejan a la de Maxwell-Boltzmann, permitiéndonos determinar fácilmente el grado relativo de ocupación de dos estados cuánticos.

En el caso de un gas de fotones, $\alpha = 0$, y el índice de ocupación de Bose-Einstein se aproxima al de Maxwell-Boltzmann cuando $\varepsilon_i \gg kT$, mientras que cuando $\varepsilon_i \ll kT$ el término -1 en el denominador de la fórmula para el primer índice de ocupación nunca excede el valor de 1, lo que significa una partícula por estado como máximo, que es una consecuencia del comportamiento de las partículas de Fermi de acuerdo con el principio de exclusión. A bajas temperaturas prácticamente están completos todos los estados inferiores de energía; con ello, el índice de ocupación cae bruscamente hasta un valor crítico de energía llamado *energía de Fermi*. A temperaturas altas, el índice de ocupación es tan pequeño para todas las energías que el principio de exclusión carece de importancia, y la distribución de Fermi-Dirac es semejante a la de Maxwell-Boltzmann.

9.11 EL LASER

Entre dos niveles de energía en un átomo, uno inferior i y uno superior j (Fig. 9-10) pueden ocurrir tres clases de transiciones que implican radiación electromagnética. Si el átomo se encuentra inicialmente en el estado i se puede elevar al estado j, absorbiendo un fotón de luz cuya energía es $h\nu = E_j - E_i$. Este proceso recibe el nombre de *absorción inducida*. Si el átomo se encuentra inicialmente en el estado superior j, puede caer al estado i emitiendo un fotón de energía $h\nu$. En este caso, se trata de una *emisión espontánea*.

Existe también una tercera posibilidad, la *emisión inducida*, en la que un fotón incidente de energía $h\nu$ causa una transición, desde el estado superior hasta el inferior. La emisión inducida no implica conceptos nuevos. Se puede comparar con un oscilador armónico, por ejemplo un péndulo, al que se le aplica una fuerza sinusoidal cuyo periodo es el mismo que su periodo natural de vibración. Si la fuerza aplicada se encuentra exactamente en fase con las oscilaciones del péndulo, la amplitud de éstas aumenta; esto corresponde a

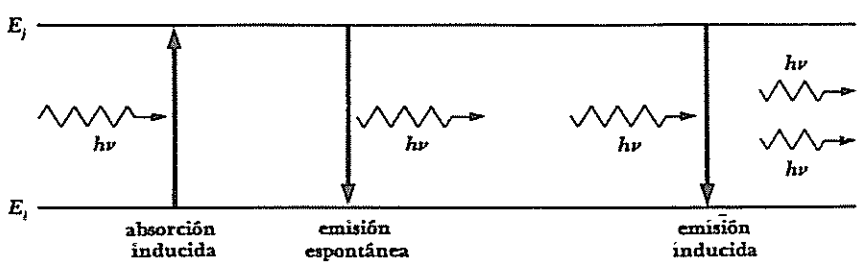


FIGURA 9-10. Las transiciones entre dos niveles de energía en un átomo pueden ocurrir por absorción inducida, emisión espontánea y emisión inducida.

la absorción inducida de energía. Sin embargo, si la fuerza aplicada está fuera de fase en 180° con las oscilaciones del péndulo, la amplitud de éstas disminuyen; esto corresponde a una emisión inducida de energía.

Puesto que $h\nu$ es generalmente mucho mayor que kT en el caso de las radiaciones atómicas y moleculares, en equilibrio térmico, la población de estados superiores de energía en un sistema atómico es considerablemente inferior a la población de estados más bajos. Supongamos que incide luz de frecuencia ν sobre un sistema en el que la diferencia de energía entre el estado base y el excitado es $h\nu$. Si el estado superior está muy poco ocupado, habrá poca emisión estimulada y las consecuencias principales que se producen son la absorción de fotones incidentes por los átomos en el estado fundamental y la subsiguiente radiación espontánea de fotones de igual frecuencia. (Cierta proporción de átomos excitados elevarán sus energías en los choques.)

Algunos sistemas atómicos pueden tener poblaciones invertidas de niveles de energía con un estado superior ocupado en mayor grado que el estado base. La Fig. 9-11 muestra un sistema de tres niveles en el que el estado intermedio 1 es metastable, lo que significa que la transición desde dicho estado hasta el estado base está prohibida por reglas de selección. El sistema puede "elevarse" hasta el estado 2 mediante una radiación de frecuencia $\nu' = (E_2 - E_0)/h$. (Los impactos de los electrones son otra forma de elevar el sistema al estado superior.) Los átomos en el estado 2 tienen una existencia aproximada de 10^{-8} en su camino hacia una transición permitida realizada por emisión espontánea, de forma que caen al estado metastable 1 (o al estado base) instantáneamente. Los estados metastables pueden tener vidas superiores a un segundo en su camino hacia la emisión espontánea y, por consiguiente, se puede continuar elevando el nivel energético hasta que haya una población mayor en el estado 1 que la que hay en el estado 0. Si hacemos llegar al sistema radiación directa de frecuencia $\nu = (E_1 - E_0)/h$ la emisión inducida de fotones de esta frecuencia excederá a la absorción, puesto que hay más átomos en el estado superior, y el resultado neto será una producción de radiación de frecuencia ν mayor que la que llega. Este es el principio del *maser* (amplificación de microondas mediante emisión estimulada de radiación) y del *laser* (amplificación de luz por emisión estimulada de radiación).

Las ondas radiadas procedentes de la emisión espontánea son incoherentes, como cabía esperar, con relaciones de fase al azar en el espacio y en el tiempo, ya que no existe coordinación entre los átomos implicados. Sin embargo, las ondas radiadas procedentes de la emisión inducida están en fase con las ondas de inducción, lo que hace posible que un maser o un laser produzcan rayos completamente coherentes. Un laser común es un tubo lleno de gas o un sólido transparente con espejos en ambos extremos; uno de estos espejos es parcialmente trasmisor para que salga algo de la luz que se produce. La luz impulsora de frecuencia ν' dirige hacia el medio activo desde los bordes del tubo, mientras las ondas transversales que van y vienen pertenecientes a la luz

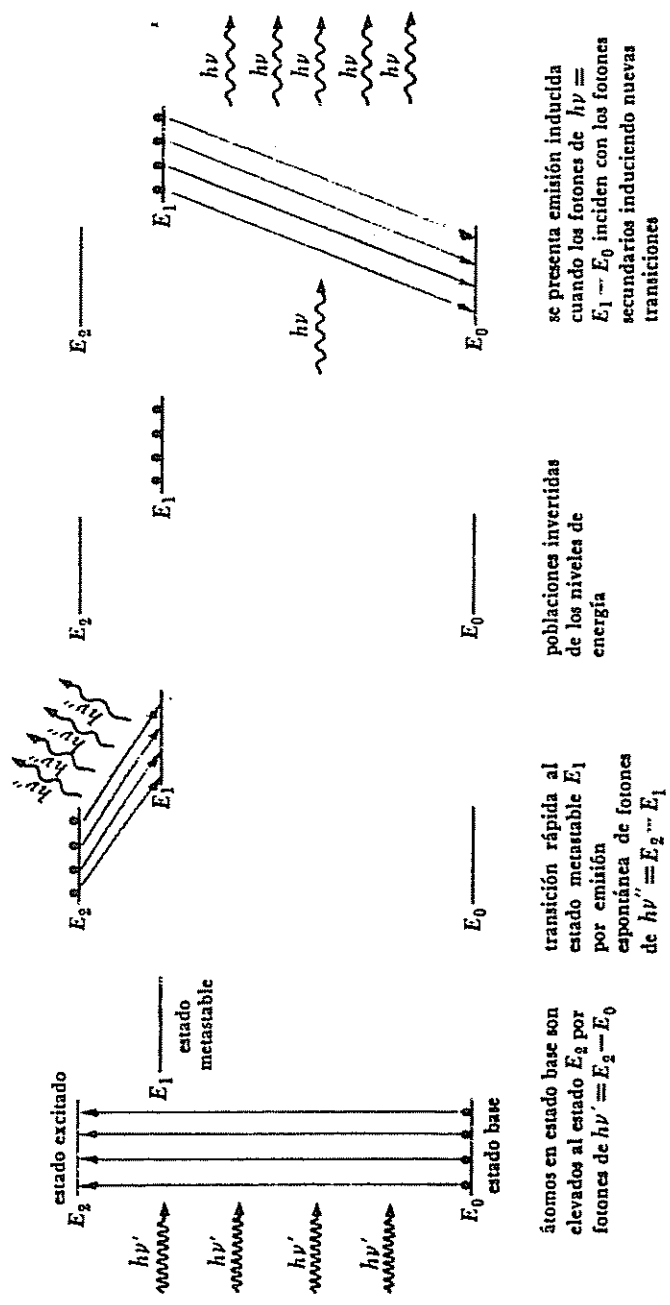


FIGURA 9-11 Principio del maser y el laser.

www.elsolucionario.org

atrapada estimulan emisiones de frecuencia ν que mantienen el haz emergente colimado. Se han proyectado gran variedad de maser y laser; en muchos de ellos, la distribución inversa de energía se obtiene de una manera menos directa que la que se consigue con el simple mecanismo descrito anteriormente.

Problemas

1. Demostrar que la velocidad más probable de una molécula de un gas ideal es $\sqrt{2kT/m}$.

2. Demostrar que la velocidad media de una molécula de un gas ideal es igual a $\sqrt{8kT/\pi m}$.

3. Hallar el valor medio de $1/v$ en un gas que obedece la estadística de Maxwell-Boltzmann.

4. ¿Qué proporción de moléculas de un gas ideal tienen componentes de velocidad en cualquier dirección mayor que dos veces la velocidad más probable?

5. Un flujo de 10^{12} neutrones/m^2 por segundo emerge de un reactor nuclear. Si estos neutrones tienen una energía de distribución de Maxwell-Boltzmann correspondiente a $T = 300°$K, calcular la densidad de neutrones en el haz.

6. La frecuencia de vibración de la molécula H_2 es 1.32×10^{14} Hz. *a*) Hallar las poblaciones relativas de los estados de vibración $v = 0$, 1, 2, 3 y 4 a 5000°K. *b*) ¿Alguna vez pueden ser iguales las poblaciones de los estados $v = 2$ y $v = 3$? En caso afirmativo, ¿a qué temperatura ocurrirá esto?

7. El momento de inercia de la molécula H_2 es 4.64×10^{-48} kg-m^2. *a*) Hallar las poblaciones relativas de los estados de rotación $J = 0$, 1, 2, 3 y 4 a 300°K. *b*) ¿Alguna vez pueden ser iguales las poblaciones de los estados $J = 2$ y $J = 3$? En caso afirmativo, ¿a qué temperatura ocurrirá esto?

8. La molécula N_2O es lineal con la longitud de enlace N—N de 1.126 Å y una longitud de enlace N—O de 1.191 Å. La masa del átomo ^{18}O es 2.66×10^{-26} kg y la del átomo ^{14}N es 2.32×10^{-26} kg. *a*) ¿Cuál es el número cuántico del nivel de energía de rotación más poblado a 300°K? *b*) Representar gráficamente n_J/n_0 en función de J a 300°K.

9. La temperatura de la cromosfera solar es aproximadamente de 5000°K. Hallar los números relativos de átomos de hidrógeno en los niveles de energía $n = 1$, 2, 3 y 4. Se debe considerar la multiplicidad de cada nivel.

10. Considerando que el filamento de tungsteno de un bulbo luminoso es equivalente a un cuerpo negro a 2900°K, hallar el porcentaje de la energía de radiación emitida en forma de luz visible con frecuencias entre 4×10^{14} y 7×10^{14} Hz.

11. La luz solar llega a la Tierra en una cantidad aproximada de 1,400 W/m^2 cuando el Sol se encuentra exactamente sobre la Tierra. El radio solar es 6.96×10^8 m y el radio medio de la órbita terrestre es 1.49×10^{11} m. A partir de estos datos, hallar la temperatura de la superficie del Sol considerando que irradia como un cuerpo negro. (La temperatura real de la superficie del Sol es ligeramente menor que este valor.)

12. El problema del espectro de cuerpo negro se estudió a fines del siglo XIX por Rayleigh y Jeans mediante métodos físicos clásicos, ya que aún no se conocía la noción de cuantos electromagnéticos. Obtuvieron la fórmula

$$\epsilon(\nu)\, d\nu = \frac{8\pi\nu^2 kT\, d\nu}{c^3}$$

a) ¿Por qué es imposible que sea correcta una fórmula que depende así de la frecuencia? *b*) Demostrar que, en el límite de $\nu \to 0$, la ley de radiación de Planck se reduce a la fórmula de Rayleigh-Jeans.

13. A la misma temperatura, ¿quién ejercerá la máxima presión, un gas de moléculas clásicas, un gas de *bosones* (partículas que obedecen a la estadística de Bose-Einstein) o un gas de *fermiones* (partículas que obedecen a la estadística de Fermi-Dirac)? ¿La presión menor? ¿Por qué?

14. Deducir la ley de Stefan-Boltzmann de la siguiente manera. Considere una máquina de Carnot, que consta de un cilindro y un pistón, cuyas superficies internas son reflectores perfectos y que emplea radiación electromagnética como substancia de trabajo. El ciclo de funcionamiento de esta máquina consiste en cuatro etapas: una expansión isotérmica a la temperatura T, durante la cual la presión permanece constante en p; una expansión adiabática, durante la cual la temperatura disminuye en dT y la presión disminuye en dp; una compresión isotérmica a la temperatura $T - dT$ y la presión $p - dp$; y una compresión adiabática a la temperatura, presión y volumen originales. La presión ejercida por radiación de densidad de energía u en un recipiente con paredes reflectoras es $u/3$, y la eficiencia de todas las máquinas de Carnot es $dW/Q = 1 - (T - dT)/T$, donde Q es la entrada de calor durante la expansión isotérmica y dW es el trabajo realizado por la máquina durante el ciclo completo. Calcular la eficiencia de esta máquina particular en función de u y T con ayuda de un diagrama p-V y demostrar que $u = aT^4$, donde a es una constante.

15. En un laser de helio-neón continuo, los átomos de He y Ne son impulsados a estados metastables respectivamente 20.61 y 20.66 eV por arriba de sus estados base por impactos de electrones. Algunos de los átomos de He excitados transfieren energía a átomos de Ne mediante choques, con la energía adicional de 0.05 eV proporcionada por la energía cinética de los átomos. Un átomo de Ne excitado emite un fotón de 6328 Å en la transición prohibida que conduce a la acción del laser. Entonces, se emite un fotón de 6680 Å en una transición permitida hacia otro estado metastable, y la energía de excitación restante se pierde en choques con las paredes del tubo. Hallar las energías de excitación de los dos estados intermedios en el Ne. ¿Por qué son necesarios los átomos de He?

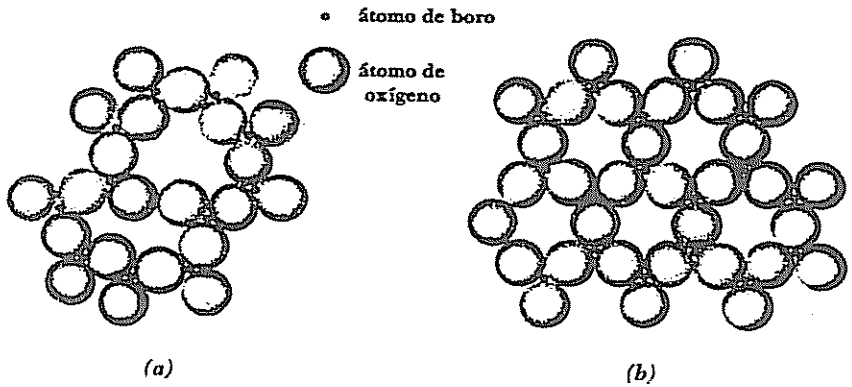
EL ESTADO SOLIDO 10

Un sólido consta de átomos, iones o moléculas íntimamente unidos, y esta proximidad es responsable de las propiedades características de este estado de la materia. Los enlaces covalentes que participan en la formación de una molécula también se presentan en algunos sólidos. Además, enlaces *iónicos*, de *van der Waals* y *metálicos* proporcionan las fuerzas de cohesión en sólidos cuyos elementos estructurales son, respectivamente, iones, moléculas y átomos metálicos. Todos estos enlaces implican fuerzas eléctricas, de manera que sus diferencias esenciales residen en la distribución de electrones en torno a las diferentes partículas, cuya disposición regular forma un sólido.

10.1 SOLIDOS CRISTALINOS Y AMORFOS

La mayoría de los sólidos son cristalinos. En ellos, los átomos, iones o moléculas que los componen repiten patrones regulares tridimensionales. La presencia de ordenamiento de largo alcance es, por tanto, definidora de las propiedades de un cristal. Otros sólidos carecen de ordenamientos de largo alcance en la disposición de sus partículas constituyentes, por lo que se pueden considerar propiamente como líquidos congelados, cuya dureza se debe a una viscosidad excepcionalmente elevada. El vidrio, la resina y muchos plásticos son ejemplos de estos sólidos amorfos ("sin forma").

Sin embargo, los sólidos amorfos presentan *ordenamientos de corto alcance* en sus estructuras. La diferencia entre los dos tipos de ordenamiento se ve claramente en el trióxido de boro(B_2O_3), que se puede presentar tanto en forma cristalina como en amorfa. En ambos casos, cada átomo de boro está rodeado por tres átomos de oxígeno, lo que representa un ordenamiento de corto alcance. En un cristal de B_2O_3, los átomos de oxígeno se presentan en formaciones



FIGURAS 10-1 Dos representaciones bidimensionales del B_2O_3. *a*) El B_2O_3 amorfo presenta sólo un ordenamiento de corto alcance. *b*) El B_2O_3 cristalino presenta un ordenamiento de largo alcance.

hexagonales, como en la Fig. 10-1, lo cual es un ordenamiento de largo alcance, mientras que el B_2O_3, amorfo, sustancia vítrea, carece de esta regularidad adicional. Tenemos un ejemplo claro de un ordenamiento de corto alcance en el agua, justo por encima del punto de fusión, momento en que presenta una densidad más baja que a mayores temperaturas, debido a que las moléculas de H_2O están agrupadas menos estrechamente cuando forman cristales que cuando tienen mayor libertad de movimiento.

Es importante proseguir con la analogía entre un sólido amorfo y un líquido para comprender ambos estados de la materia. Generalmente se considera que los líquidos se parecen más a los gases que a los sólidos; después de todo, tanto líquidos como gases son fluidos y a temperaturas arriba del punto crítico ambos son indistinguibles. Sin embargo, desde el punto de vista microscópico, los líquidos y los sólidos también tienen mucho en común. La densidad de un líquido dado se aproxima generalmente a la del sólido correspondiente, por ejemplo, lo que sugiere que el grado de agrupación es semejante. Esta deducción se apoya en la compresibilidad de estos estados. Además, la difracción de rayos X indica que muchos líquidos tienen estructuras definidas de corto alcance en cualquier instante. Estas estructuras son semejantes a las de los sólidos amorfos, excepto en que las agrupaciones de las moléculas líquidas se desvían continuamente.

Como los sólidos amorfos son esencialmente líquidos, no tienen puntos de fusión agudos. Podemos interpretar este comportamiento sobre una base microscópica observando que, como un sólido amorfo carece de patrón de orden mayor, los enlaces entre sus moléculas varían en fuerza. Cuando se calienta el sólido, los enlaces más débiles se rompen a temperaturas más bajas que los otros, de manera que se va ablandando gradualmente. En un sólido

cristalino, la transición entre ordenamientos de largo alcance y ordenamientos de corto alcance (o carencia total de ordenamiento) implica la ruptura de enlaces cuyas fuerzas son más o menos idénticas, y la fusión se presenta a una temperatura definida con precisión.

10.2 CRISTALES IONICOS

Los enlaces covalentes se producen cuando los átomos comparten pares de electrones de manera que se producen fuerzas de atracción. Los enlaces iónicos se producen cuando átomos que tienen baja energía de ionización, y que pierden electrones con facilidad, entran en contacto con otros. Los primeros ceden electrones a los segundos, de modo que aquéllos se convierten en iones positivos y éstos en iones negativos. En un cristal iónico, los iones forman una configuración en equilibrio, donde la fuerza de atracción entre iones de distinto signo predomina sobre la de repulsión entre los de mismo signo. Al igual que en las móleculas, los cristales evitan su desmoronamiento debido a la influencia de las fuerzas de cohesión presentes por la acción del principio de exclusión, que exige la ocupación de los estados de energía más elevada cuando las capas electrónicas de átomos diferentes se superponen y se enlazan entre sí.

La Tabla 10.1 contiene las energías de ionización de los elementos, y la Fig. 10.2 muestra cómo estas energías varían con el número atómico. No es difícil ver por qué las energías de ionización de los elementos varían de esta manera

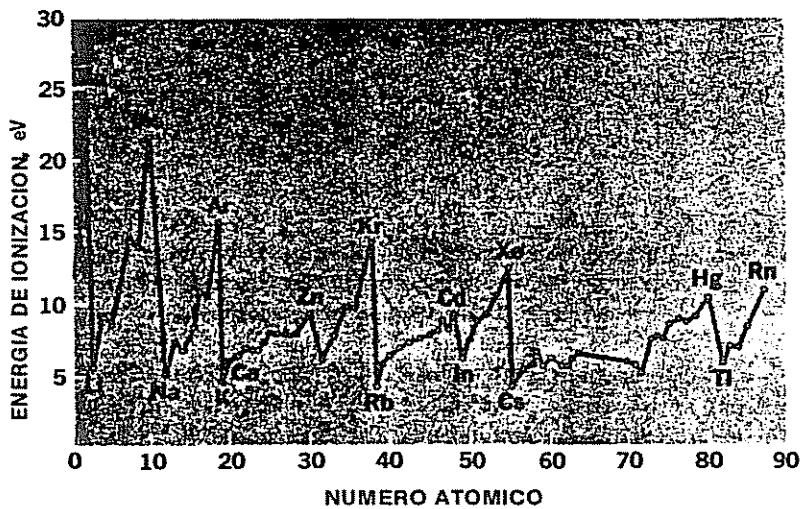


FIGURA 10-2 Variación de la energía de ionización con el número atómico.

www.elsolucionario.org

Tabla 10.1

ENERGIA DE IONIZACION DE LOS ELEMENTOS: En electrón volts.

I																	2
II																	He
13.6																	24.6
3	4											5	6	7	8	9	10
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
5.4	9.3											8.3	11.3	14.5	13.6	17.4	21.6
11	12											13	14	15	16	17	18
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
5.1	7.6											6.0	8.1	11.0	10.4	13.0	15.8
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
4.3	6.1	6.6	6.8	6.7	6.8	7.4	7.9	7.9	7.6	7.7	9.4	6.0	7.9	9.8	9.8	11.8	14.0
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
4.2	5.7	6.5	7.0	6.8	7.1	7.3	7.4	7.5	8.3	7.6	9.0	5.8	7.3	8.6	9.0	10.5	12.1
55	56	*	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
3.9	5.2		5.5	7.9	8.0	7.9	8.7	9.2	9.0	9.2	10.4	6.1	7.4	7.3	8.4	—	10.7
87	88	†															
Fr	Ra																
—	5.3																

*	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
	5.6	6.9	5.8	6.3	—	5.6	5.7	6.2	6.7	6.8	—	6.1	5.8	6.2	5.0
†	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lw
	—	7.0	—	6.1	—	5.1	6.0	—	—	—	—	—	—	—	

Por ejemplo, un átomo de cualquiera de los metales alcalinos del grupo I tiene un único electrón *s* fuera de una subcapa cerrada. Los electrones de las capas internas protegen parcialmente al electrón externo de la carga nuclear + Ze, de manera que la carga efectiva que sujeta al electrón externo al átomo es $+e$ en vez de $+Ze$. Se tiene que realizar un trabajo relativamente pequeño para desprender un electrón de este átomo, y los metales alcalinos forman fácilmente iones positivos. Cuanto mayor es el átomo, más alejado del núcleo se encuentra el electrón exterior (Fig. 10-3) y más débil es la fuerza electrostática que actúa sobre él; ésta es la razón por la que la energía de ionización disminuye generalmente a medida que descendemos en cualquier grupo. El aumento en la energía de ionización, de la izquierda a derecha, a través de

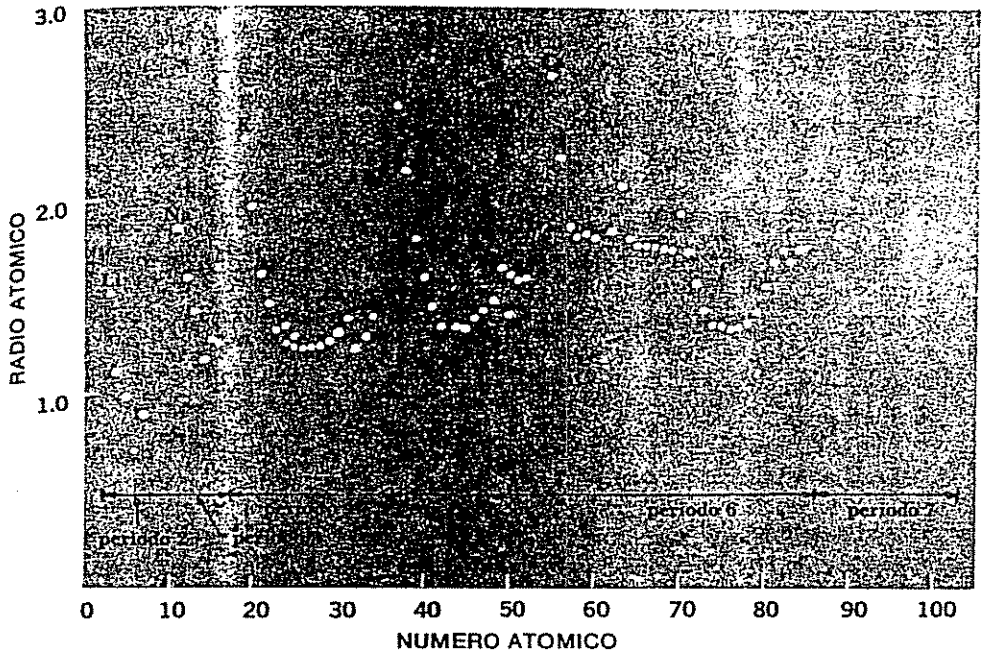


FIGURA 10-3 Radios atómicos de los elementos. Algunos tienen dos radios correspondientes a diferentes estructuras cristalinas.

cualquier periodo, se explica por el aumento en carga nuclear, mientras que el número de electrones de blindaje internos permanece constante. Hay dos electrones en la capa interna de los elementos del periodo 2, y la carga nuclear efectiva que actúa sobre los electrones externos de estos átomos es, por tanto, $+(z-2)e$. El electrón externo de un átomo de litio está unido al átomo por una carga efectiva de $+e$, mientras que cada electrón externo en el berilio, el boro, el carbono, etc., está unido a su átomo matriz por cargas efectivas de $+2e$, $+3e$, $+4e$, etc.

En el extremo opuesto de los átomos de metales alcalinos, que tienden a perder sus electrones externos, se encuentran los átomos halógenos, que tienden a completar sus subcapas externas *p* capturando, cada una de ellas, un electrón. La ***afinidad electrónica*** de un elemento se define como la energía liberada cuando un electrón se incorpora a un átomo de cada elemento. Cuanto mayor es la afinidad electrónica, con mayor firmeza se enlaza el electrón incorporado. La Tabla 10.2 muestra las afinidades electrónicas de los halógenos. En general, las afinidades electrónicas disminuyen cuando se desciende de grupo en grupo en la tabla periódica, y aumenta de izquierda a derecha dentro de cada periodo. La determinación experimental de las afinidades electrónicas es bastante difícil y sólo se conocen con precisión las de algunos elementos.

Tabla 10.2
AFINIDADES ELECTRONICAS DE LOS HALOGENOS
en electrón volts.

Flúor	3.45
Cloro	3.61
Bromo	3.36
Yodo	3.06

Se puede presentar un enlace iónico entre dos átomos cuando uno de ellos tiene energía de ionización baja y, por tanto, tiende a convertirse en ion positivo, mientras que el otro tiene una afinidad electrónica elevada y por tanto tiende a convertirse en ion negativo. El sodio, que tiene una energía de ionización de 5.14 eV, es un ejemplo del primero, y el cloro, que tiene una afinidad electrónica de 3.61 eV, es un ejemplo del segundo. Cuando el ion Na^+ y el ion Cl^- se encuentran próximos y con libertad de movimiento, los une la fuerza electrostática de atracción que se establece entre ellos. La condición para que resulte una molécula estable de NaCl es sencillamente que la energía total del sistema de los dos iones sea menor que la energía total de un sistema de dos átomos de los mismos elementos; si no es así, el electrón excedente en el ion Cl^- se transferiría al ion Na y no se podrían enlazar por mucho tiempo los átomos neutros de Na y Cl. Veamos si este criterio se cumple en el caso del NaCl.

En general, en un cristal iónico cada ion se encuentra rodeado por tantos iones del signo opuesto como quepan, lo que conduce al máximo de estabilidad. Los tamaños relativos de los iones implicados gobiernan, por tanto, el tipo de estructura que se presenta. En las Figs. 10-4 y 10-5 se muestran dos tipos comunes de estructura que se encuentran en cristales iónicos. En un cristal de cloruro sódico se puede considerar que los iones de

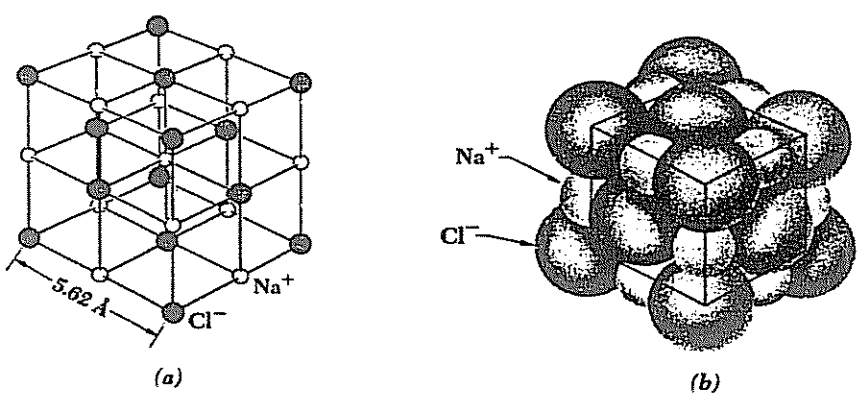


FIGURA 10-4 a) Estructura cúbica centrada en las caras de un cristal de NaCl. El número de coordinación (número de los vecinos más próximos de cada ion) es 6. *b*) Modelo a escala de un cristal de NaCl.

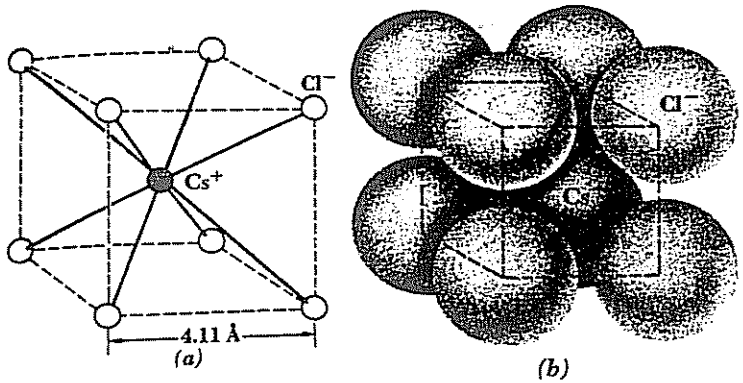


FIGURA 10-5 *a*) Estructura cúbica centrada en el cuerpo de un cristal de NaCl. El número de coordenación es 8. *b*) Modelo a escala de un cristal de CsCl.

ambos tipos se encuentran en los vértices y en los centros de las caras de un conjunto de cubos, intercalándose los conjuntos de Na^+ y Cl^-. De esta manera, cada ion tiene seis próximos vecinos de otra clase, consecuencia de la diferencia considerable de tamaño entre los iones Na^+ y Cl^-. Este tipo de estructura recibe el nombre de *cúbica centrada en las caras*. Se observa una disposición diferente en los cristales de cloruro de cesio, donde cada ion se encuentra en el centro de un cubo cuyos vértices están ocupados por iones del otro tipo. Cada ion tiene ocho próximos vecinos del otro tipo en esta estructura *cúbica centrada en el cuerpo*, que resulta cuando los iones participantes son comparables en tamaño.

La *energía de cohesión* en un cristal iónico es la energía que se liberaría en la formación del cristal a partir de átomos neutros individuales. La energía de cohesión se expresa generalmente en eV/átomo, en eV/molécula o en kcal/mol, donde "molécula" y "mol" se refieren aquí a conjuntos de átomos especificados por la fórmula del compuesto de que se trate (por ejemplo, NaCl en el caso de un cristal de cloruro sódico) aun cuando no existan estas moléculas en el cristal.

La principal contribución a la energía de cohesión de un cristal iónico es la energía potencial electrostática $V_{coulomb}$ de los iones. Consideremos un ion Na^+ en NaCl. Sus vecinos más próximos son seis iones Cl^-, cada uno separado por una distancia r. La energía potencial del ion Na debida a estos seis iones Cl^- es, por tanto,

$$V_1 = -\frac{6e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

Los siguientes vecinos más próximos son 12 iones Na^+, separado cada uno por una distancia $\sqrt{2}\,r$ ya que la diagonal de un cuadrado de lado r es $\sqrt{2}\,r$. La energía potencial del ion Na^+ debida a los 12 iones Na^+ es

$$V_2 = +\frac{12e^2}{4\pi\varepsilon_0 \sqrt{2}\,r}$$

Si se continuan sumando todos los iones + y - de un cristal de tamaño infinito, tenemos como resultado

$$V_{\text{coulomb}} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\left(6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \cdots\right)$$

$$= -1.748\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

10.1 $$= -\alpha\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$ Energía coulomb de un cristal iónico

(Evidentemente, este resultado se mantiene también para la energía potencial de un ion Cl^-.) La cantidad α recibe el nombre de *constante de Madelung* del cristal y tiene idéntico valor para todos los cristales de la misma estructura. Cálculos similares para otras variedades de cristal conducen a diferentes constantes de Madelung: en cristales que tienen estructuras como las del cloruro de cesio (Fig. 10-5), por ejemplo, $\alpha = 1.763$, los de estructura parecida a la de la blenda de cinc (una forma de ZnS) tienen un $\alpha = 1.638$. Las estructuras cristalinas simples tienen constantes de Madelung que van desde 1.6 hasta 1.8.

La contribución de energía potencial de las fuerzas de repulsión debidas a la acción del principio de exclusión se puede expresar con una buena aproximación en la forma

10.2 $$V_{\text{de repulsión}} = \frac{B}{r^n}$$

El signo de $V_{\text{de repulsión}}$ es positivo, lo que corresponde a una interacción de repulsión, y la dependencia de r^{-n} (donde n es un número grande) corresponde a una fuerza de corto alcance que aumenta rápidamente cuando disminuye la distancia internuclear r. La energía potencial total V de cada ion debida a sus interacciones con todos los demás es, por tanto,

$$V = V_{\text{coulomb}} + V_{\text{de repulsión}}$$

10.3 $$= -\frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + \frac{B}{r^n}$$

En la separación de equilibrio r_0 entre los iones V_r es un mínimo por definición y, en consecuencia, $(dV/dr) = 0$ cuando $r = r_0$. Por tanto,

$$\left(\frac{dV}{dr}\right)_{r=r_0} = \frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0^2} - \frac{nB}{r_0^{n+1}} = 0$$

$$\frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0^2} = \frac{nB}{r_0^{n+1}}$$

10.4 $$B = \frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 n} r_0^{n-1}$$

y la energía potencial total es

10.5 $$V = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}\left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

Es posible calcular el exponente n a partir de las compresibilidades observadas de los cristales iónicos. El resultado promedio es $n \approx 9$, lo que significa que la fuerza de repulsión varía bastante bruscamente con r: los iones son "duros" en vez de "blandos" y resisten bien el ser empacados estrechamente. A la distancia iónica de equilibrio, la repulsión mutua debida al principio de exclusión (distinta de la repulsión electrostática entre iones iguales) disminuye la energía potencial en un 11% aproximadamente. Evidentemente, el conocimiento preciso de n no es esencial; si $n = 10$ en vez de $n = 9$, V variaría únicamente en un 1%.

En un cristal de NaCl, la distancia de equilibrio r_0 entre iones es 2.81 Å. Como $\alpha = 1.748$ y $n = 9$, la energía potencial de un ion de cualquier signo es

$$V = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}\left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

$$= -\frac{9 \times 10^9\ \text{N-m}^2/\text{C}^2 \times 1.748 \times (1.60 \times 10^{-19}\ \text{C})^2}{2.81 \times 10^{-10}\ \text{m}}\left(1 - \frac{1}{9}\right)$$

$$= -1.27 \times 10^{-18}\ \text{J}$$

$$= -7.97\ \text{eV}$$

Debido a que no podemos contar cada ion más de una vez, únicamente la mitad de esta energía potencial, o sea, −3.99 eV, representa la contribución *por ion* a la energía de cohesión del cristal.

También tenemos que tomar en cuenta la energía necesaria para transferir un electrón del átomo de Na al átomo de Cl y formar un par de iones Na^+—Cl^-. Esta energía de transferencia de electrones es la diferencia entre la energía de ionización +5.14 eV del Na y la afinidad electrónica −3.61 eV del Cl, o sea, +1.53 eV. Por tanto, cada átomo contribuye con +0.77 eV a la energía de cohesión a partir de esta fuente. Así, la energía de cohesión total por átomo es

$$E_{\text{de cohesión}} = (-3.99 + 0.77)\ \text{eV/átomo} = -3.22\ \text{eV/átomo}$$

Una cifra empírica de la energía de cohesión de un cristal iónico se puede obtener midiendo su temperatura de evaporación, su energía de disociación y su energía de intercambio de electrones. El resultado, en el caso del NaCl, es 3.28 eV, que concuerda completamente con el valor teórico calculado.

La mayoría de los sólidos iónicos son duros, debido a la solidez de los enlaces entre sus iones constituyentes, y tienen elevados puntos de fusión. Generalmente también son quebradizos, ya que el deslizamiento entre sí de los

www.elsolucionario.org

átomos, en que explica la ductilidad de los metales, se evita por la ordenación de los iones positivos y negativos impuesta por la naturaleza de los enlaces. Los líquidos polares, como el agua, pueden disolver muchos cristales iónicos, pero los líquidos covalentes, como la gasolina, generalmente no pueden hacerlo.

10.3 CRISTALES COVALENTES

Las fuerzas de cohesión en los cristales covalentes surgen de la presencia de electrones entre átomos adyacentes. Cada átomo que participa en un enlace covalente contribuye con un electrón al enlace, y estos electrones son compartidos por ambos átomos en lugar de ser propiedad exclusiva de uno de ellos, como en el enlace iónico. El diamante es un ejemplo de cristal cuyos átomos están unidos por enlaces covalentes. La Fig. 10-6 muestra la estructura de un cristal de diamante; la disposición tetraédrica es consecuencia de la capacidad de cada carbono para formar enlaces covalentes con cuatro átomos más (ver Fig. 8-16).

Los cristales puramente covalentes son relativamente raros en número. Además del diamante, otros ejemplos son el silicio, el germanio y el carburo de silicio; en el SiC, cada átomo está rodeado por cuatro átomos del otro tipo en la misma estructura tetraédrica que la del diamante. Todos los cristales covalentes son duros (el diamante es la sustancia más dura que se conoce, y el SiC es el abrasivo industrial carborundo), tienen puntos de fusión elevados y son insolubles en todos los líquidos ordinarios, comportamiento que refleja la fuerza de los enlaces covalentes. Energías de cohesión de 3 a 5 eV/átomo son comunes

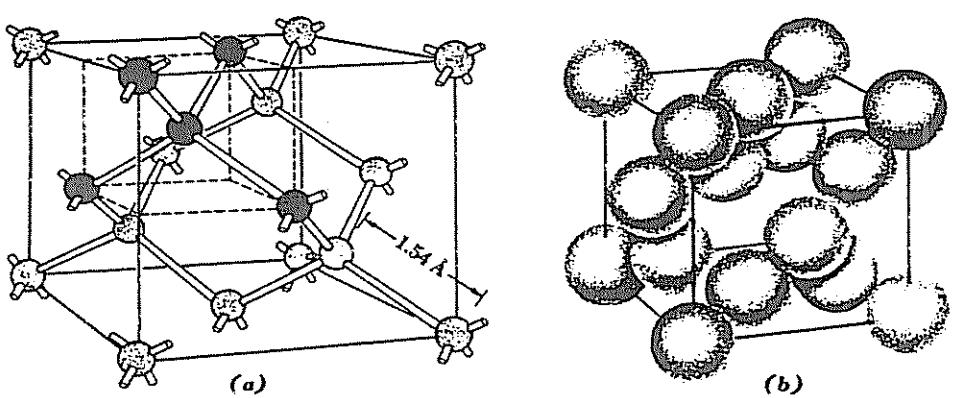


FIGURA 10-6 *a*) **Estructura tetraèdrica del diamante. El número de coordinación es 4.** *b*) **Modelo a escala del cristal de diamante.**

en los cristales covalentes. Este es el mismo orden de magnitud de las energías de cohesión en los cristales iónicos.

Hay varias maneras de averiguar si los enlaces en un cristal dado no metálico y no molecular son predominantemente iónicos o covalentes. En general, un compuesto de un elemento del grupo I o II de la tabla periódica, con uno del grupo VI o VII presenta enlace iónico en el estado sólido. Otra guía es el número de coordinación del cristal, que es el número de vecinos más próximos en torno a cada partícula constituyente. Un número de coordinación elevado sugiere un cristal iónico, ya que es difícil ver cómo un átomo puede formar puramente enlaces covalentes con otros seis átomos (en estructuras cúbicas centradas en las caras, como la del NaCl) o con otros ocho átomos (en estructuras cúbicas centradas en el cuerpo, como la del CsCl). Sin embargo, un número de coordinación de 4, como en la estructura del diamante, es compatible exclusivamente con el carácter covalente. Por supuesto, como ocurre con las moléculas, no siempre es posible clasificar un cristal particular como totalmente iónico o covalente: el AgCl, cuya estructura es la misma que la del NaCl, y el CuCl, cuya estructura se parece a la del diamante, tienen ambos enlaces de carácter intermedio, como ocurre con muchos otros sólidos.

10.4 FUERZAS DE VAN DER WAALS

Todos los átomos y las moléculas —aun átomos de gases inertes, como los del helio y el argón— presentan atracciones débiles, de corto margen entre sí debidas a fuerzas de *van der Waals*. Estas fuerzas son responsables de la condensación de los gases en líquidos y de la congelación de líquidos para formar sólidos, a pesar de la ausencia de mecanismos de enlace iónico, covalente o metálico. Algunos aspectos comunes del comportamiento de la materia en general, como la fricción, la tensión superficial, la viscosidad, la adhesión, la cohesión, etc., se deben a las fuerzas de van der Waals. La atracción de van der Waals entre dos moléculas colocadas a una distancia r es proporcional a r^{-7}, de manera que es significativa solamente para moléculas que se encuentran muy juntas.

Notamos que muchas moléculas tienen momento dipolar eléctrico permanente (*moléculas polares*). Un ejemplo es la molécula de agua, H_2O, donde la concentración electrónica en el átomo de oxígeno hace que este extremo de la molécula sea más negativo que el ocupado por los átomos de hidrógeno. Estas moléculas tienden a alinearse unas con otras, de modo que los extremos de signo opuesto queden adyacentes, como en la Fig. 10-7. En esta posición, las moléculas se atraen fuertemente entre sí.

Una molécula polar es capaz también de atraer a otras moléculas que no tienen normalmente momento dipolar. El fenómeno se representa en la Fig. 10-8; el campo eléctrico de la molécula polar produce una separación de cargas en la otra molécula, de modo que se crea un momento inducido en el mismo sentido que el de la molécula polar. El resultado es la aparición de una

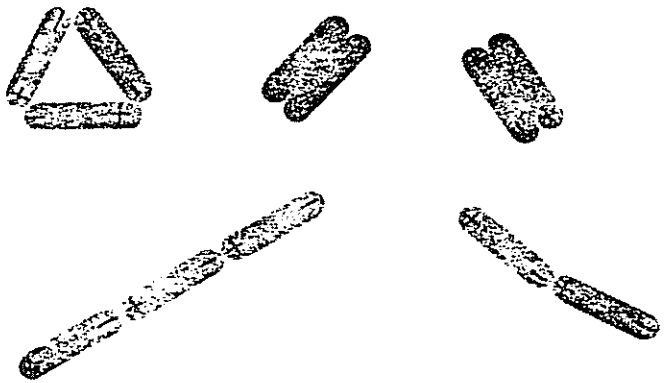


FIGURA 10-7 Las moléculas polares se atraen.

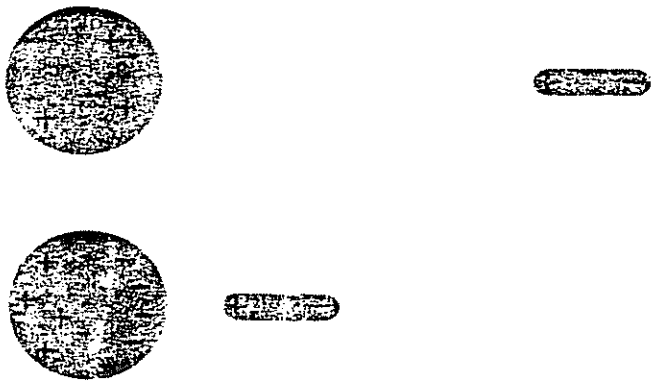


FIGURA 10-8 Las moléculas polares atraen a moléculas polarizables.

fuerza de atracción. (El efecto es el mismo que el que se produce en la atracción de una pieza de hierro no magnética por otra que si lo es.)

Notablemente, dos moléculas no polares se pueden atraer entre sí por el mecanismo expuesto anteriormente. Aun cuando la distribución de electrones en una molécula no polar es simétrica *en promedio*, los electrones en sí están en movimiento constante, y *en cualquier instante dado* una parte u otra de la molécula tiene un exceso de ellos. En lugar de la asimetría de carga fija de una molécula polar, una molécula no polar presenta una asimetría constantemente cambiante. Cuando dos moléculas no polares se encuentran lo suficientemente cerca, sus distribuciones de carga fluctuante tienden a cambiar simultáneamente. Los extremos adyacentes presentan siempre signos opuestos (Fig. 10-9) y por ello siempre causan una fuerza de atracción. Este tipo de fuerzas debe su nombre al físico alemán van der Waals, quien sugirió su existencia, hace

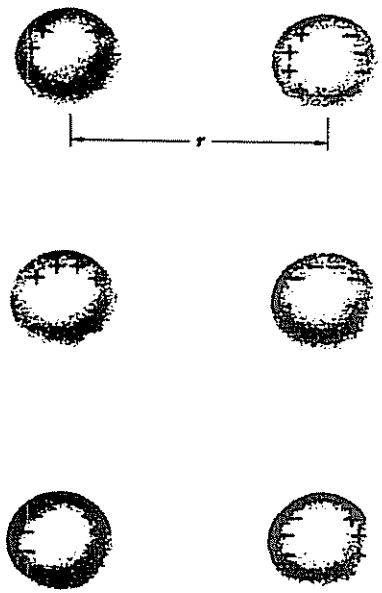


FIGURA 10-9 En promedio, las moléculas no polares tienen distribuciones de carga simétricas, pero en todo instante las distribuciones son asimétricas. Las fluctuaciones en las distribuciones de carga de las moléculas próximas se coordinan según se indica, lo que produce una fuerza de atracción entre ellas, cuya magnitud es proporcional a $1/r^7$.

aproximadamente un siglo, para explicar algunas divergencias observadas en la ley del gas ideal; la explicación del mecanismo real de la fuerza es, por supuesto, más reciente.

Las fuerzas de van der Waals son mucho más débiles que las encontradas en los enlaces iónico o covalente. Como resultado, los cristales tienen puntos de fusión y ebullición bajos y su resistencia mecánica es pequeña. Las energías de cohesión son bajas, únicamente 0.08 eV/átomo en el argón sólido (punto de fusión −189°C), 0.01 eV/molécula en el hidrógeno sólido (punto de fusión −259°C) y 0.1 eV/mólecula en el metano sólido, CH (punto de fusión 183°C).

Entre algunas moléculas que contienen átomos de hidrógeno se presenta un tipo de enlace de van der Waals especialmente fuerte, denominado *enlace hidrógeno*. La distribución de electrones en este átomo está tan distorsionada por la afinidad del átomo "matriz" hacia los electrones, que cada átomo de hidrógeno, en esencia, ha donado la mayor parte de su carga negativa al átomo matriz dejando atrás un protón pobremente protegido. De ello, resulta una molécula con una carga positiva localizada, que es capaz de vincularse con la concentración de carga negativa de otra parte en otra molécula del mismo tipo. Aquí el factor clave es el tamaño real pequeño del protón pobremente blindado, ya que las fuerzas varían con r^{-2}.

Las moléculas de agua son excepcionalmente propensas a formar enlaces hidrógeno, debido a que los cuatro pares de electrones en torno al átomo de O ocupan orbitales híbridos sp^3 que se proyectan hacia afuera como si fueran los

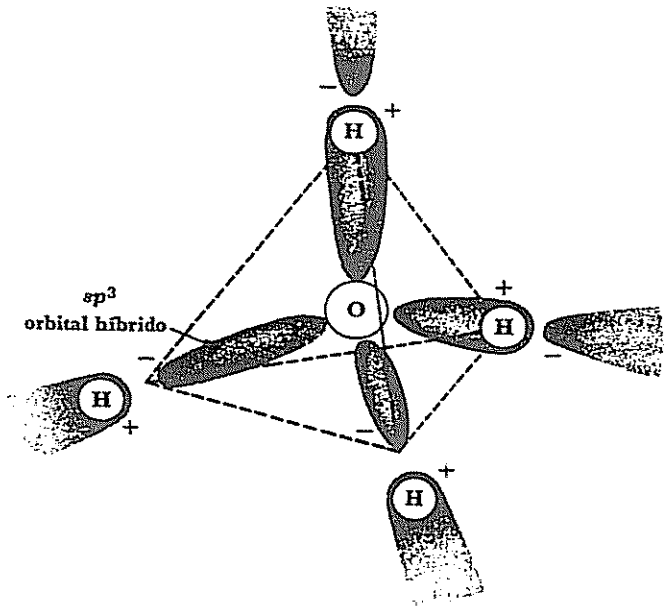


FIGURA 10-10 En una molécula de H_2O, los cuatro pares de electrones de valencia en torno al átomo de oxígeno (seis aportados por el átomo O y uno por cada átomo de H) ocupan cuatro orbitales híbridos sp^3 que forman una figura tetraédrica. Cada molécula de H_2O puede formar enlaces hidrógeno con otras cuatro moléculas de H_2O.

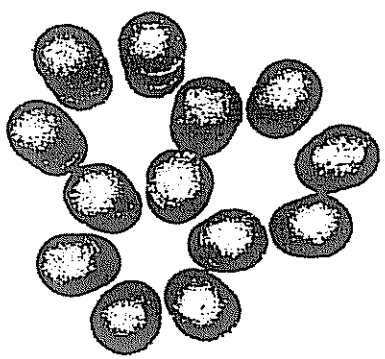


FIGURA 10-11 Vista superior de un cristal de hielo que muestra la disposición hexagonal abierta de las moléculas de H_2O. Cada molécula tiene cuatro vecinas próximas a las cuales está unida por enlaces hidrógeno.

vértices de un tetraedro (Fig. 10-10). Los átomos de hidrógeno se encuentran en dos de estos vértices, que en consecuencia presentan cargas positivas localizadas, mientras que los otros dos vértices presentan cargas negativas algo más difusas. Cada molécula de H_2O puede, por tanto, formar enlaces hidrógeno con otras cuatro moléculas de H_2O; en dos de estos enlaces, la molécula central proporciona los protones de unión, y en las otras dos los dan las moléculas enlazadas. En el estado líquido, los enlaces hidrógeno entre moléculas de H_2O adyacentes se están rompiendo continuamente y volviéndose a formar debido a la agitación térmica; pero, aun así, en cualquier instante las moléculas siguen combinadas en grupos definidos. En el estado sólido, estos grupos son grandes y estables y constituyen cristales de hielo.

El modelo hexagonal característico de un cristal de hielo (Fig. 10-11) tiene su origen en la disposición tetraédrica de los cuatro enlaces hidrógeno en los que puede participar cada molécula de H_2O. Con únicamente cuatro próximos vecinos en torno a cada molécula, los cristales de hielo tienen estructuras sumamente abiertas, lo que explica la densidad excepcionalmente baja del hielo. Debido a que los racimos moleculares son menores y menos estables en el estado líquido, las moléculas de agua están en promedio más íntimamente unidas que las moléculas de hielo, y el agua tiene una densidad mayor: por tanto, el hielo flota. La densidad del agua aumenta de 0° C a un máximo a los 4° C, a medida que los grupos de moléculas grandes de H_2O se rompen para formar otros más pequeños que ocupan menos espacio en el agregado; sólo a partir de los +4°C se manifiesta la expansión térmica normal de un líquido, disminuyendo la densidad a medida que aumenta la temperatura.

10.5 EL ENLACE METALICO

El concepto fundamental en que se basa la teoría de los metales es que los electrones de valencia de los átomos que forman el metal pueden ser comunes al agregado atómico global, de modo que una especie de "gas" de electrones libres lo llena todo. La interacción entre este gas electrónico y los iones positivos del metal da lugar a una gran fuerza de cohesión. La presencia de tales electrones explica con claridad las altas conductividades eléctrica y térmica, la opacidad, el brillo de la superficie y otras propiedades específicas de los metales. Sin duda, tanto en un metal como en cualquier sólido, los electrones no son capaces de moverse en su interior con completa libertad. Siempre están influidos en alguna forma por las otras partículas presentes, y cuando se profundiza en la teoría de los metales, para incluir estas complicaciones, surge una imagen intuitiva que concuerda totalmente con los datos experimentales.

Se podría obtener cierto conocimiento sobre la capacidad de los átomos metálicos para enlazarse y formar cristales de tamaño ilimitado, considerando el enlace metálico como un enlace covalente no saturado. Comparemos el proceso de unión en dos miembros del grupo I del sistema periódico: el

www.elsolucionario.org

hidrógeno y el litio. Una molécula de H_2 tiene dos electrones *1s* con spines opuestos; el máximo número de electrones *K* que puede tener. Esta molécula H_2 está, por tanto, saturada, ya que el principio de exclusión exige que cualquier electrón adicional esté en un estado de energía mayor, y la unión estable de cada átomo H adicional no se puede presentar, a menos que sus electrones estén en el estado *1s*. En principio, puede parecer que el litio está obligado a comportarse de una manera similar teniendo la configuración electrónica $1s^2 2s$. Hay, sin embargo, seis estados *2p sin llenar* en cada átomo de Li, cuyas energías son ligeramente mayores que la de los estados *2s*. Cuando un átomo de Li se acerca a una molécula de Li_2 se une a ella fácilmente, con un enlace covalente, sin violar el principio de exclusión, y la moléculas Li_3, resultante es estable, ya que todos sus electrones de valencia permanecen en capas *L*. No hay límite para el número de átomos de Li que pueden unirse de esta manera, ya que el litio forma un cristal cúbico centrado en el cuerpo (Fig. 105), en el que cada átomo tiene otros ocho a su alrededor. Con sólo un electrón disponible por átomo para formar enlace, cada uno de éstos supone un cuarto de electrón por término medio, en lugar de los dos que son necesarios en un enlace covalente ordinario. Existe así un enlace no saturado. Esto se aplica igualmente para los enlaces de otros metales.

Una consecuencia del carácter no saturado del enlace metálico es el hecho de que las propiedades de una mezcla de átomos metálicos diferentes no depende críticamente de la proporción de cada tipo de átomos, con tal que sus tamaños sean semejantes. Así, las características de una aleación generalmente varían con facilidad cuando cambia su composición, en contraposición con las proporciones atómicas específicas encontradas en sólidos iónicos y en sólidos covalentes, como el SiC.

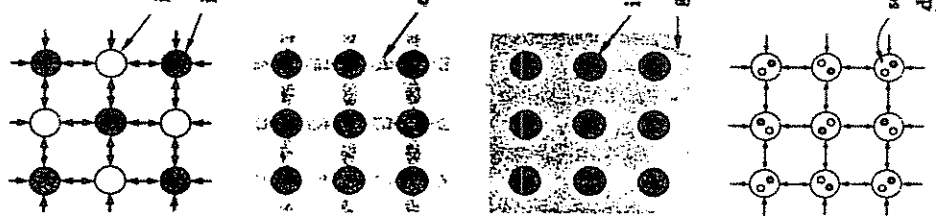
La consecuencia más notoria de los enlaces no saturados en un metal es la capacidad que tienen los electrones de valencia de errar libremente de átomo en átomo. Para comprender intuitivamente este fenómeno, podemos pensar que cada electrón de valencia se mueve constantemente de enlace en enlace. En el sólido Li, cada electrón participa en ocho enlaces, de manera que gasta poco tiempo entre dos pares de iones Li^+. El electrón no puede recordar (por decirlo así) a cuál de los dos iones pertenece en realidad, y es más fácil que se mueva hacia un enlace que de ninguna manera implique a su ion matriz. Por tanto, los electrones de valencia de un metal se comportan de una manera muy similar a las moléculas de un gas.

Como en el caso de cualquier otro sólido, los átomos de metal se adhieren debido a que su energía colectiva es más baja cuando están enlazados que cuando existen como átomos separados. Para comprender por qué se presenta esta reducción de energía en un cristal metálico, notamos que, debido a la proximidad de los iones, cada electrón de valencia, en promedio, está más próximo a uno u otro núcleo de lo que estaría si perteneciese a un átomo aislado. En consecuencia, la energía potencial del electrón es menor en el

Tabla 10.3

TIPOS DE CRISTALES

Tipo	Enlace	Ejemplo	Propiedades
Iónico	Atracción electrostática	Cloruro de sodio NaCl *E* de cohesión = 3.28 eV/átomo	Duro; puntos de fusión elevados; pueden ser solubles en líquidos polares, como el agua.
Covalente	Electrones compartidos	Diamante C *E* de cohesión = 7.4 eV/ átomo	Muy duro; puntos de fusión elevados; insoluble en casi todos los solventes.
Metálico	Gas de electrones	Sodio Na *E* de cohesión = 1.1 eV/ átomo	Dúctil; brillo metálico; conductividades eléctrica y térmica elevadas.
Molecular	Fuerzas de van der Waals	Metano CH_4 *E* de cohesión = 0.1 eV/átomo	Blando; puntos de fusión y de ebullición bajos; soluble en líquidos covalentes.



cristal que en el átomo, y la disminución de la energía potencial es la responsable del enlace metálico.

Sin embargo, hay que considerar otro factor. Mientras que la energía potencial del electrón se reduce en un cristal metálico, la energía cinética del electrón aumenta. Los electrones libres en un metal constituyen un sistema único de electrones y el principio de exclusión prohíbe que más de dos de ellos (uno por spin) ocupen cada nivel de energía. A primera vista parecería que, utilizando de nuevo al litio como ejemplo, sólo ocho electrones de valencia en todo un cristal de Li ocuparían/estados cuánticos $n = 2$; los demás se verían forzados a estados cada vez mayores de energía, de manera que toda la estructura quedaría destruida. Lo que ocurre, en realidad, es menos dramático. Los niveles de energía de valencia de los diferentes átomos metálicos se alteran todos por sus interacciones y se produce una *banda de energía* que consta de tantos niveles de energía estrechamente espaciados como número total de niveles de energía de valencia en todos los átomos de cristal. En consecuencia, los electrones libres tienen una energía cinética que oscila entre 0 y un máximo u_F, llamada *energía Fermi*; la energía Fermi en el litio, por ejemplo, es 4.72 eV, y la energía cinética promedio de los electrones libres en el litio metálico es 2.8 eV. Como la energía cinética del electrón es una cantidad positiva, su aumento en el metal por encima de su valor en los átomos separados conduce a una repulsión.

El enlace metálico se presenta cuando la atracción entre los iones metálicos positivos y el gas de electrones excede la mutua repulsión de los electrones en este gas, esto es, cuando la reducción de la energía potencial del electrón excede en magnitud al aumento concomitante en la energía cinética del electrón. Cuanto mayor es el número de electrones de valencia por átomo, más elevada es en promedio la energía cinética en un cristal metálico, pero sin que haya una caída proporcional en la energía potencial. Por esta razón, los elementos metálicos se encuentran casi todos en los primeros tres grupos de la tabla periódica. Algunos elementos se encuentran en la línea de demarcación y pueden formar cristales, tanto metálicos como covalentes. El estaño es un ejemplo notable. Por encima de 13.2° C tenemos el metal "estaño blanco", cuyos átomos tienen seis vecinos próximos. Por debajo de 13.2° C tenemos el sólido covalente "estaño gris", cuya estructura es igual a la del diamante. El estaño blanco y el estaño gris son sustancias bien diferentes; por ejemplo, tienen densidades respectivas de 5.8 y 7.3 g/cm^3, y el estaño gris es un semiconductor, mientras que el estaño blanco tiene la elevada conductividad eléctrica común de un metal.

10.6 LA TEORIA DE BANDAS DE LOS SOLIDOS

En casi todos los sólidos cristalinos, sean metales o no, los átomos están tan próximos entre sí, que los electrones de valencia constituyen un sistema único de electrones comunes a todo el cristal. Este sistema de electrones cumple el

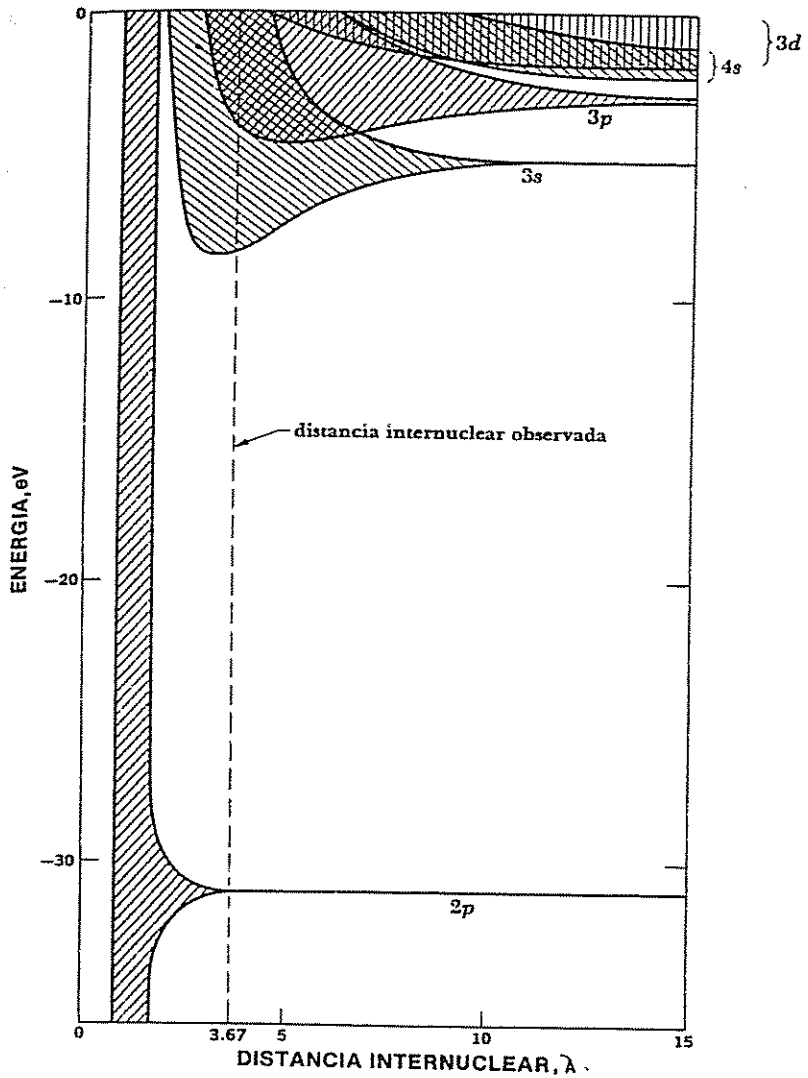


FIGURA 10-12 Los niveles de energía del sodio se convierten en bandas a medida que disminuye su distancia internuclear. La distancia internuclear observada en el sodio sólido es 3.67 Å.

principio de exclusión, puesto que los estados de energía de las capas externas de los átomos están todos alterados de alguna manera por sus interacciones mutuas. En lugar de cada nivel de energía de características bien definidas de un átomo individual, todo el cristal posee una banda de energía compuesta de una miríada de niveles muy próximos unos a otros. Al existir en el cristal tantos

niveles como átomos, la banda no se puede distinguir de un desarrollo continuo de energías permitidas. La presencia de bandas de energía, los saltos que pueden existir entre ellas, y el grado en que pueden estar llenos por electrones, no sólo determinan el comportamiento de un sólido, sino también tienen una influencia importante en otras de sus propiedades.

Hay dos maneras de considerar el origen de las bandas de energía. La más sencilla es investigar qué ocurre a los niveles de energía de átomos aislados cuando se hace que se vayan aproximando para formar un sólido. Abordaremos el tema de esta manera y examinaremos así alguna de las consecuencias de la noción de bandas de energía. Más adelante analizaremos las bandas de energía en función de las restricciones impuestas por la periodicidad de una red cristalina en el movimiento de los electrones; este enfoque, más importante, proporciona la base de gran parte de la teoría moderna de los sólidos.

La Fig. 10-12 muestra los niveles de energía en el sólido en función de la distancia internuclear. El nivel 3*s* es el primer nivel ocupado en el átomo de sodio que se ensancha y forma una banda; el nivel 2*p* no empieza a ensancharse hasta que la separación entre núcleos es bastante pequeña. Este comportamiento refleja la manera como las subcapas electrónicas del átomo de sodio se comportan al irse uniendo los átomos. Las energías medias en las bandas 3*p* y 3*s* caen al principio, implicando fuerzas de atracción. La distancia internuclear real en el sodio sólido queda indicada, y corresponde a una situación de energía media mínima.

Las bandas de energía en un sólido corresponden a los niveles de energía de un átomo, de modo que un electrón en un sólido puede poseer aquellas energías que caen dentro de estas bandas. En un sólido, las bandas se pueden traslapar (Fig. (10.13), en cuyo caso sus electrones tienen una distribución continua de energías permitidas. En otros sólidos, las bandas *no* se pueden traslapar (Fig. 10-14) y los intervalos entre ellas representan energías que no pueden poseer los electrones. Estos intervalos reciben el nombre de *bandas prohibidas*. El comportamiento eléctrico de un sólido cristalino depende de la estructura de sus bandas de energía y de cómo estén ocupadas normalmente por electrones.

La Fig. 10-15 es un diagrama simplificado de los niveles de energía de un átomo de sodio y de las bandas de energía del sodio sólido. El átomo de sodio

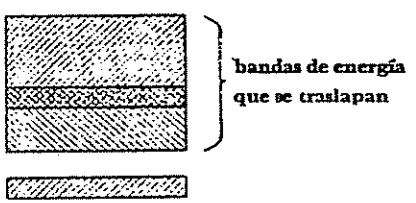


FIGURA 10-13 Las bandas de energía en un sólido pueden traslaparse.

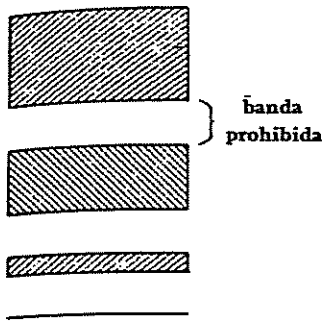


FIGURA 10-14 Una banda prohibida separa bandas de energía que no se traslapan.

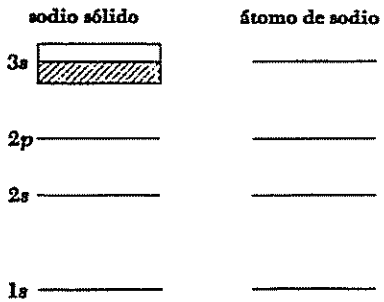


FIGURA 10-15 Niveles de energía en el átomo de sodio y bandas correspondientes en el sodio sólido (no a escala). Ver Fig. 10-12.

tiene solamente un electrón 3*s* en su capa externa. Esto significa que la banda 3*s* en un cristal de sodio está ocupada sólo a la mitad, ya que cada nivel en la banda, como en el átomo, es sólo capaz de contener *dos* electrones. Cuando se aplica un campo eléctrico a un trozo de sodio, los electrones, mientras permanecen en sus bandas de energía originales, adquieren fácilmente energía adicional. Esta energía se encuentra en forma de energía cinética, de modo que el movimiento de electrones contribuye a crear una corriente eléctrica. De esta manera, el sodio resulta ser un buen conductor de la electricidad, lo mismo que otros sólidos cristalinos que tienen bandas de energía sólo parcialmente llenas.

La Fig. 10-16 es un diagrama simplificado de energía del diamante. Hay una banda de energía totalmente ocupada por electrones, separada por un salto de 6 eV de la banda vacía que está por encima de ella. Esto quiere decir que hay que suministrar 6 eV de energía adicional a un electrón en un cristal de diamante para que pueda tener energía cinética, ya que no puede tener una energía comprendida en una banda prohibida. Un aumento de energía de esta magnitud no puede suministrarse fácilmente a un electrón en un cristal por medio de un campo eléctrico. Un electrón que se mueve en un cristal choca con una imperfección de la red cristalina después de un recorrido medio de alrededor de $\sim 10^{-8}$ m, de modo que en el choque pierde mucha de la energía

www.elsolucionario.org

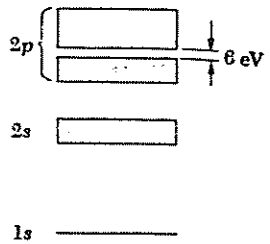


FIGURA 10-16 Bandas de energía en el diamante (no a escala)

obtenida del campo eléctrico. Es necesaria una intensidad de campo eléctrico de 6×10^8 V/m para que un electrón gane 6 eV en un recorrido de 10^{-8} m. Esta cantidad es más de 10^{10} veces mayor que la requerida para producir corriente en el sodio. El diamante es, por tanto, un mal conductor de la electricidad y, en consecuencia, está clasificado como un aislante.

El silicio tiene una estructura cristalina parecida a la del diamante y, como en el diamante, un espacio separa la parte superior de una banda de energía llena de la banda vacía siguiente. Sin embargo, la banda prohibida en el silicio tiene una amplitud de sólo 1.1 eV. A temperaturas bajas, el silicio es un conductor un poco mejor que el diamante, pero a temperatura ambiente, una pequeña proporción de sus electrones poseen la energía cinética de origen térmico necesaria para saltar sobre la banda prohibida y entrar en la banda de energía superior. Estos electrones son suficientes para permitir que circule algo de corriente cuando se aplica un campo eléctrico. El silicio tiene una resistividad eléctrica intermedia entre un conductor y un aislante; o sea, es un *semiconductor*.

La resistividad de los semiconductores puede ser afectada considerablemente por pequeñas cantidades de impurezas. Supongamos que introducimos unos cuantos átomos de arsénico en un cristal de silicio. Los átomos de arsénico tienen cinco electrones en su capa externa, mientras que los de silicio sólo tienen cuatro. (La configuración de estas capas son $4s^24p^3$ y $3s^23p^2$ respectivamente.) Cuando un átomo de arsénico sustituye a uno de silicio en un cristal de silicio, cuatro de sus electrones forman enlaces covalentes con los átomos más próximos. El quinto electrón necesita poca energía para separarse y moverse en el cristal (ver Probls. 23 y 24). Como se observa en la Fig. 10-17, la

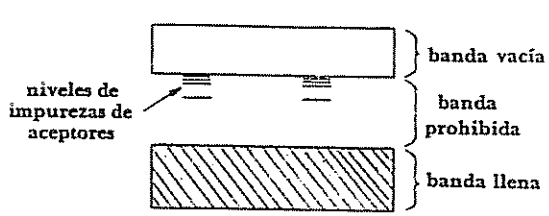


FIGURA 10-17 Indicios de arsénico en un cristal de silicio dan lugar a niveles aceptores en la banda normalmente prohibida, produciendo un semiconductor tipo-n.

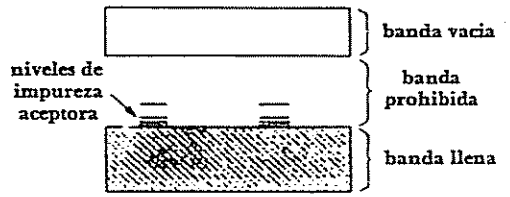


FIGURA 10-18 Indicios de galio en un cristal de silicio dan lugar a niveles aceptores en la banda normalmente prohibida, produciendo un semiconductor tipo *p*.

presencia de arsénico como impureza da lugar a niveles de energía por debajo de la banda que los electrones deben ocupar para que tenga lugar la conducción. Estos niveles reciben el nombre de *niveles aceptores*, y la sustancia correspondiente se llama semiconductor *tipo n*, ya que la corriente eléctrica en él es transportada por las cargas negativas.

Si, por el contrario, incorporamos átomos de galio a un cristal de silicio, se presenta un efecto diferente. Los átomos de galio tienen solamente tres electrones en sus capas externas, cuya configuración es $4s^24p$, y su presencia deja vacantes, denominadas *huecos*, en la estructura electrónica del cristal. Un electrón requiere poca energía para entrar en un hueco, pero al hacerlo deja un nuevo hueco en su emplazamiento anterior. Cuando se aplica un campo eléctrico a través de un cristal de silicio que contenga indicios de galio, los electrones se desplazan hacia el ánodo de hueco en hueco. El flujo de corriente se describe aquí convenientemente haciendo referencia a los huecos, cuyo comportamiento es como el de las cargas positivas, ya que se mueven hacia el electrodo negativo. Una sustancia de este tipo recibe el nombre de semiconductor *tipo p*. (Algunos metales, como el cinc, conducen principalmente corriente por movimiento de huecos.) En el diagrama de bandas de energía de la Fig. 10-18 vemos que la presencia de galio proporciona niveles de energía, llamados *niveles aceptores*, justo por encima de la banda llena más alta. Todos los electrones que ocupan estos niveles dejan tras de sí, en la banda que llenaron con anterioridad, vacantes que permiten el flujo de corriente eléctrica.

10.7 ENERGIA DE FERMI

Ahora estudiaremos con detenimiento las propiedades de los electrones libres en un metal. Los electrones son partículas Fermi, ya que obedecen al principio de exclusión y, por tanto, el gas electrónico en un metal presenta una distribución de energías de Fermi-Dirac (Secc. 9.9). La ley de distribución de Fermi-Dirac para el número de electrones n_i con la energía ε_i es

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha} e^{\varepsilon_i/kT} + 1} \tag{10.6}$$

Es mejor considerar una distribución continua de la energía de los electrones que la distribución discreta de la Ec. 10.6. Así, tenemos que la ley de la distribución viene a ser

10.7 $$n(\varepsilon)\,d\varepsilon = \frac{g(\varepsilon)\,d\varepsilon}{e^{\alpha}e^{\varepsilon/kT} + 1}$$

Para determinar $g(\varepsilon)\,d\varepsilon$, el número de estados cuánticos posibles para los electrones con energías comprendidas entre ε y $\varepsilon + d\varepsilon$ aplicaremos el mismo principio empleado para el gas de fotones en la radiación de cuerpo negro. La correspondencia es exacta ya que hay dos estados de spin posibles, $m_s = +\frac{1}{2}$ y $m_s = -\frac{1}{2}$, para los electrones, de modo que duplicando el número de celdas del espacio fase utilizable, que es lo mismo que la existencia de dos direcciones posibles de polarización para fotones idénticos, se duplica el número de celdas para un gas de fotones. En función del momentum, vimos en la Sec. 9.8 que

$$g(p)\,dp = \frac{8\pi V p^2\,dp}{h^3}$$

Para electrones no relativistas

$$p^2\,dp = (2m^3\varepsilon)^{1/2}\,d\varepsilon$$

con lo que resulta que

10.8 $$g(\varepsilon)\,d\varepsilon = \frac{8\sqrt{2}\pi V m^{3/2}}{h^3}\varepsilon^{1/2}\,d\varepsilon$$

El siguiente paso es calcular el parámetro α. Para ello, vamos a considerar el gas de electrones a bajas temperaturas. En la Sec. 9.10 ya se vio que el índice de ocupación, al ser T pequeño, vale 1, desde $\varepsilon = 0$ hasta casi la energía de Fermi ε_F, donde cae rápidamente a 0. Esta situación refleja el efecto del principio de exclusión: ningún estado puede contener más de un electrón, de modo que la energía mínima de la configuración de un gas de electrones es aquella en que los estados más bajos están completos y los restantes vacíos. Si establecemos que

10.9 $$\alpha = -\frac{\varepsilon_F}{kT}$$

el índice de ocupación es

10.10 $$f(\varepsilon) = \frac{n(\varepsilon)}{g(\varepsilon)} = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\varepsilon_F)/kT} + 1}$$

Esta fórmula concuerda con el principio de exclusión. Para $T = 0°$ K,

$$f(\varepsilon) = 1 \text{ cuando } \varepsilon < \varepsilon_F$$
$$= 0 \text{ cuando } \varepsilon > \varepsilon_F$$

Al aumentar la temperatura, el índice de ocupación varía desde 1 a 0 cada vez más gradualmente (Fig. 10-19). Para cualquier temperatura

$$f(\varepsilon) = \tfrac{1}{2} \text{ cuando } \varepsilon = \varepsilon_F$$

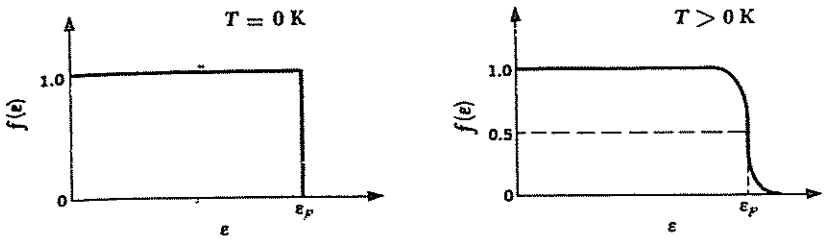


FIGURA 10-19 Indice de ocupación para la distribución de Fermi-Dirac en el cero absoluto y a temperatura más elevada.

Si un metal determinado tiene N electrones libres, podremos calcular su energía de Fermi ε_F completando sus estados de energía con dichos electrones en orden creciente de la misma, partiendo de $\varepsilon = 0$. El estado completo más elevado de energía tendrá, por definición, la energía $\varepsilon = \varepsilon_F$. El número de electrones que pueden tener la misma energía ε es igual al número de estados $g(\varepsilon)$ que tienen dicha energía, puesto que cada estado está limitado a un solo electrón. Por tanto,

10.11 $$\int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon)\,d\varepsilon = N$$

Sustituyendo $g(\varepsilon)\,d\varepsilon$ por la Ec. 10.8,

$$N = \frac{8\sqrt{2}\pi V m^{3/2}}{h^3}\int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon^{1/2}/d\varepsilon$$
$$= \frac{16\sqrt{2}\pi V m^{3/2}}{3h^3}\varepsilon_F^{3/2}$$

y

10.12 $$\varepsilon_F = \frac{h^2}{2m}\left(\frac{3N}{8\pi V}\right)^{2/3}$$ energía de Fermi

El término N/V es la densidad de electrones libres; por tanto, ε_F es independiente de las dimensiones de la muestra metálica que se considere.

Calculemos la energía de Fermi para el cobre por medio de la Ec. 10.12. La configuración electrónica del estado base del átomo de cobre es $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s$; cada átomo tiene, pues, un único electrón $4s$ exterior a una capa completa. Es razonable pensar que cada átomo de cobre contribuye con un electrón libre al gas de electrones. En consecuencia, la densidad electrónica $\eta = N/V$ es igual al número de átomos de cobre por unidad de volumen, que viene dada por

$$\frac{\text{Atomos}}{\text{Volumen}} = \frac{(\text{átomos/kmol}) \times (\text{masa/volumen})}{\text{masa/kmol}}$$

10.13 $$= \frac{N_0 \rho}{w}$$

Aquí

N_0 = número de Avogadro = 6.02×10^{26} átomos/kmol
ρ = densidad del cobre = 8.94×10^3 kg/m^3
w = Peso atómico del cobre = 63.5 kg/kmol

de modo que

$$\eta = \frac{6.02 \times 10^{26} \text{ átomos/kmol}) \times 8.94 \times 10^3 \text{ kg/m}^3}{63.5 \text{ kg/kmol}}$$
$$= 8.5 \times 10^{28} \text{ átomos/m}^3$$
$$= 8.5 \times 10^{28} \text{ electrones/m}^3$$

La energía de Fermi correspondiente es (Ec. 10.12)

$$\varepsilon_F = \frac{(6.63 \times 10^{-34} \text{ J-s})^2}{2 \times 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg/electrón}} \left(\frac{3 \times 8.5 \times 10^{28} \text{ electrones/m}^3}{8\pi}\right)^{2/3}$$
$$= 1.13 \times 10^{-18} \text{ J}$$
$$= 7.04 \text{ eV}$$

En el cero absoluto, $T = 0°$ K, el cobre tendría electrones con energías hasta de 7.04 eV. Por el contrario, *todas* las moléculas de un gas ideal en el cero absoluto tendrían una energía igual a cero. Debido a su comportamiento marcadamente no clásico, el gas de electrones de un metal se dice que está *degenerado*. La Tabla 10.4 da las energías de Fermi de varios metales comunes.

10.8 DISTRIBUCION DE ENERGIAS ELECTRONICAS

Si sustituimos α y $g(\varepsilon)\,d\varepsilon$ en la Ec. 10.7 obtenemos una fórmula que nos da el número de electrones de un gas de electrones que tienen energías comprendidas entre ε y $\varepsilon + d\varepsilon$. Esta fórmula es

10.14 $$n(\varepsilon)\,d\varepsilon = \frac{(8\sqrt{2}\pi\, Vm^{3/2}/h^3)\varepsilon^{1/2}\,d\varepsilon}{e^{(\varepsilon-\varepsilon_F)/kT} + 1}$$

Si expresamos el numerador de la Ec. 10.14 en función de la energía de Fermi ε_F, tenemos

10.15 $$n(\varepsilon)\,d\varepsilon = \frac{(3N/2)\varepsilon_F^{-3/2}\varepsilon^{1/2}\,d\varepsilon}{e^{(\varepsilon-\varepsilon_F)/kT} + 1}$$

Esta ecuación se representa en la Fig. 10-20 para temperaturas $T = 0°$, 300° y 1 200° K.

Es interesante determinar la energía media de los electrones en el cero absoluto. Para ello, calcularemos primero la energía total U_0 a 0° K, que es

$$U_0 = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon n(\varepsilon)\,d\varepsilon$$

Tabla 10.4
ALGUNAS ENERGIAS DE FERMI

Metal		Energía de Fermi, eV
Litio	Li	4.72
Sodio	Na	3.12
Aluminio	Al	11.8
Potasio	K	2.14
Cesio	Cs	1.53
Cobre	Cu	7.04
Cinc	Zn	11.0
Plata	Ag	5.51
Oro	Au	5.54

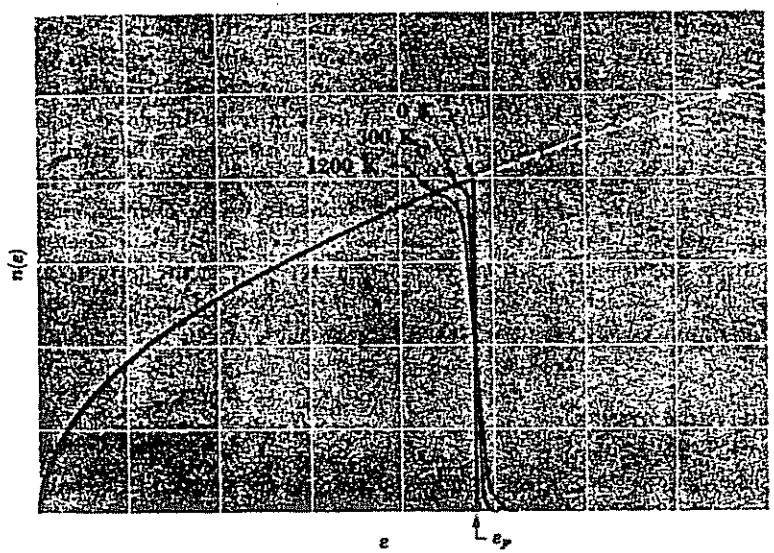


FIGURA 10-20 Distribución de las energías electrónicas en un metal a varias temperaturas.

www.elsolucionario.org

Puesto que para $T = 0°$ K, todos los electrones tienen energías menores o iguales a la energía de Fermi ε_F, tenemos que

$$e^{(\varepsilon-\varepsilon_F)/kT} = 0$$

y

$$U_0 = \frac{3N}{2}\varepsilon_F^{-3/2}\int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon^{3/2}\, d\varepsilon$$

10.16 $$= \frac{3}{5}N\varepsilon_F$$

La energía electrónica media $\overline{\varepsilon}_0$ es igual a la energía total dividida entre el número N de electrones presentes, por lo que

10.17 $$\overline{\varepsilon}_0 = \frac{3}{5}\varepsilon_F$$

Puesto que las energías de Fermi para metales son normalmente del orden de algunos electrón-volts, la energía electrónica media será también del mismo orden. La temperatura de un gas ideal, cuyas moléculas tengan una energía cinética media de 1 eV, es 11.600 K, lo que significa que si los electrones libres se comportan clásicamente, una muestra de cobre tendría que tener una temperatura de unos 50.000° K para que sus electrones pudieran tener la misma energía media que la que realmente tienen a 0°K.

La cantidad considerable de energía cinética que poseen los electrones de valencia en el gas de electrones de un metal, supone una influencia de repulsión, como se señaló en la Sec. 10.5. El hecho de que un grupo de átomos metálicos se reúnan para formar un sólido, exige que le sea dada a los electrones de valencia una energía adicional para poder elevarlos a los estados de energía superiores exigidos por el principio de exclusión. Los átomos de un metal sólido están, no obstante, más próximos entre sí que lo que estarían de cualquier otra manera. En consecuencia, los electrones de valencia están, por término medio, más próximos al núcleo del átomo en un sólido metálico que lo que están en un átomo del metal aislado. Por tanto, estos electrones tienen energía potencial más pequeña en el primer caso que en el segundo. Esta energía potencial es lo suficientemente pequeña como para dar lugar a una fuerza de cohesión neta, aun en el caso en que se tuviera en cuenta la energía cinética añadida al electrón.

10.9 ZONAS DE BRILLOUIN

Vamos ahora a examinar más detalladamente cómo se originan bandas permitidas y prohibidas en un sólido. La idea fundamental es que un electrón en un cristal se mueve en una región de potencial periódicamente variable (Fig. 10-21) en vez de hacerlo en una región de potencial constante; de ello resultan

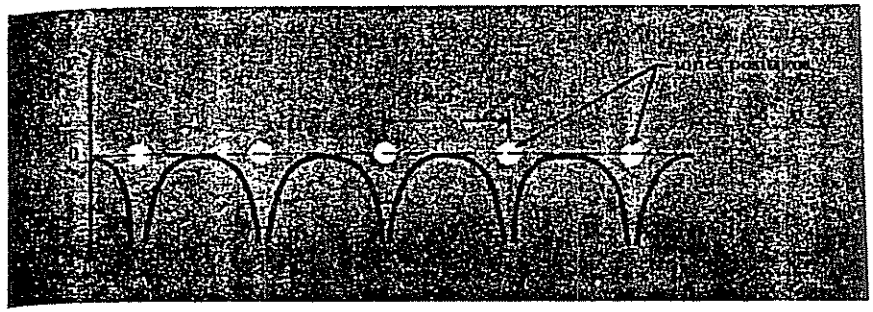


FIGURA 10-21 Energía potencial de un electrón en una ordenación periódica de iones positivos.

efectos de difracción que limitan al electrón dentro de determinados márgenes de momenta que corresponden a las bandas de energía permitidas. Bajo este punto de vista, las interacciones entre los átomos influyen indirectamente en el comportamiento de los electrones de valencia a través de la red cristalina donde se efectúan estas interacciones, y no directamente como se vio en el caso descrito en la Sec. 10.6. Aquí utilizaremos un razonamiento intuitivo en lugar de emplear el razonamiento formal que está basado en la ecuación de Schrödinger.

La longitud de onda de De Broglie de un electrón libre, de momentum p, es

10.18 $$\lambda = \frac{h}{p}$$ Electrón libre

Los electrones de baja energía que no participan en el enlace pueden viajar libremente a través del cristal, ya que sus longitudes de onda son grandes con relación al espaciamiento a de la red. Los electrones de mayor energía, como los que tienen energía Fermi en un metal, tienen longitudes de onda comparables a a. Estos electrones son precisamente difractados de la misma manera que los rayos X (Sec. 2.4) o los electrones de un haz que incide desde el exterior sobre el cristal (Sec. 3.5). (Cuando el valor de λ se aproxima a a, $2a$, $3a$, . . . no se puede aplicar la ecuación 10.18, como se vio anteriormente.) Un electrón de longitud de onda λ sufre "reflexión" de Bragg desde uno de los planos atómicos de un cristal cuando se acerca al plano a un ángulo θ, donde a partir de la Ec. 2.8

10.19 $$n\lambda = 2a\,\mathrm{sen}\,\theta \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Es común tratar la situación de las ondas electrónicas en un cristal sustituyendo λ por el número de onda k que se presentó en la Sec. 3.3, donde

10.20 $$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$ Número de onda

El número de onda es igual al número de radianes por metro en el tren de ondas que describe. Como el tren de ondas se mueve en la dirección de la partícula, podemos describir al tren de ondas por medio de un vector k. La fórmula de Bragg en función de k es

10.21 $$k = \frac{n\pi}{a \operatorname{sen} \theta}$$

La Fig. 10-22 muestra la reflexión de Bragg en una red cuadrada bidimensional. Evidentemente, podemos expresar la condición de Bragg diciendo que la reflexión desde las filas verticales de iones ocurre cuando la componente k en la dirección de k_x es igual a $n\pi/a$. En forma similar, la reflexión desde las filas horizontales ocurre cuando $k_y = n\pi/a$.

Consideremos primero los electrones cuyos números de onda son lo suficientemente pequeños para que no ocurra difracción. Si k es menor que π/a, el electrón se puede mover libremente por la red en cualquier dirección. Cuando $k = \pi/a$, no se pueden mover en las direcciones x o y por difracción. Cuanto más exceda k a π/a, más se limitan las direcciones posibles de movimiento, hasta llegar a $k = \pi/a \operatorname{sen} 45° = \sqrt{2}\pi/a$, y entonces los electrones se difractan aun cuando se muevan diagonalmente a través de la red.

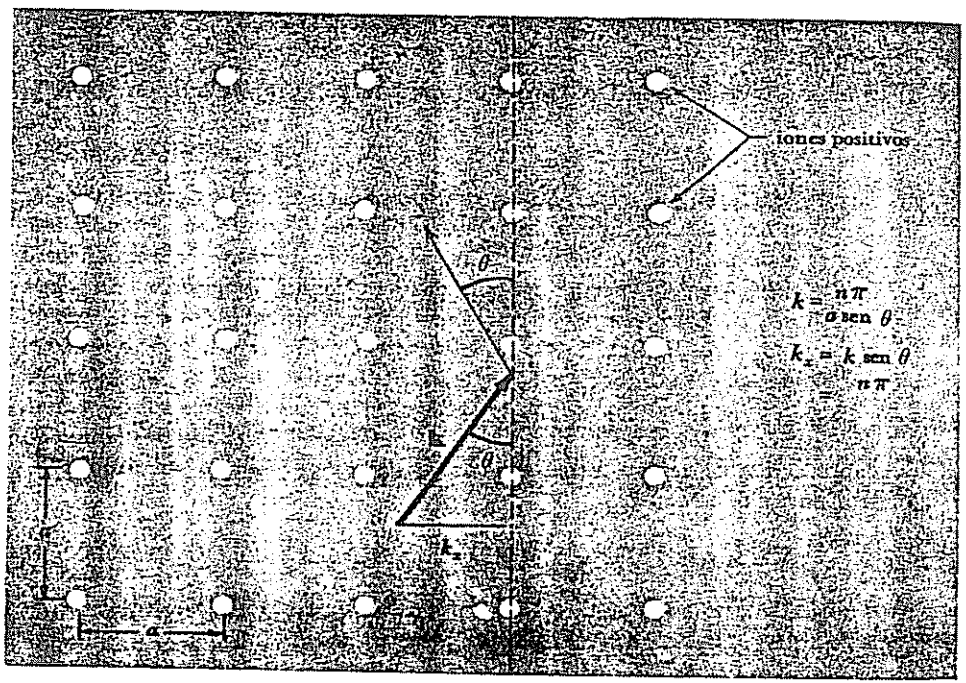


FIGURA 10-22 Se presenta reflexión de Bragg desde las filas verticales de iones cuando $k_x = n\pi/a$.

La región del espacio k que pueden ocupar los electrones de baja k sin ser difractados, recibe el nombre de *primera zona de Brillouin*, y se muestra en la Fig. 10-23. También se indica la segunda zona de Brillouin; contiene electrones con $k > \pi/a$ que ya no se incluyen en la primera zona, pero que tienen constantes de propagación lo suficientemente pequeñas para evitar la difracción por los conjuntos diagonales de planos atómicos de la Fig. 10-22. La segunda zona contiene electrones con valores k que van de π/a a $2\pi/a$ para electrones que se desplazan en las direcciones $\pm x$ y $\pm y$. El posible margen de valores k se va estrechando a medida que se van aproximando a direcciones diagonales. Las sucesivas zonas de Brillouin se pueden construir de la misma manera. La ampliación de este análisis a estructuras realmente tridimensionales conduce a las zonas de Brillouin indicadas en la Fig. 10-24.

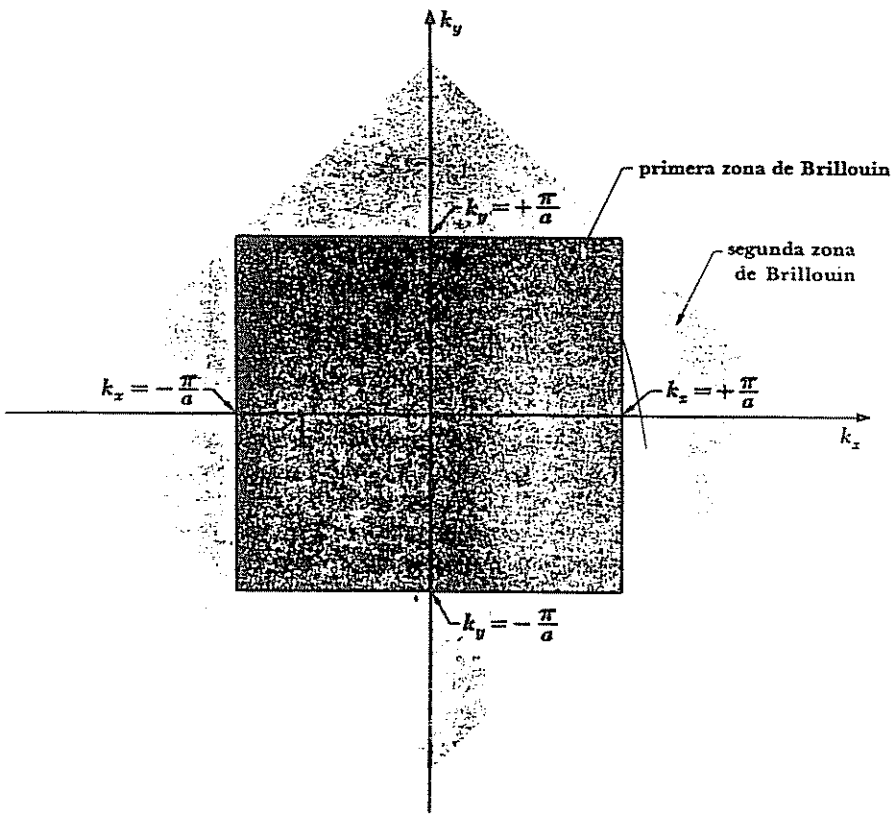


FIGURA 10-23 Primera y segunda zonas de Brillouin de una red cuadrada bidimensional.

*10.10 EL ORIGEN DE LAS BANDAS PROHIBIDAS

El significado de las zonas de Brillouin se manifiesta cuando examinamos las energías de los electrones en cada zona. La energía de un electrón libre se relaciona con su momentum p mediante la fórmula

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

y, por tanto, con su número de onda k por la ecuación

10.22 $$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

En el caso de un electrón en un cristal para el que $k \ll \pi/a$, prácticamente no existe interacción con la red, y es válida la Ec. 10.22. Como la energía de este electrón depende de k^2, las líneas de contorno de energía constante en un

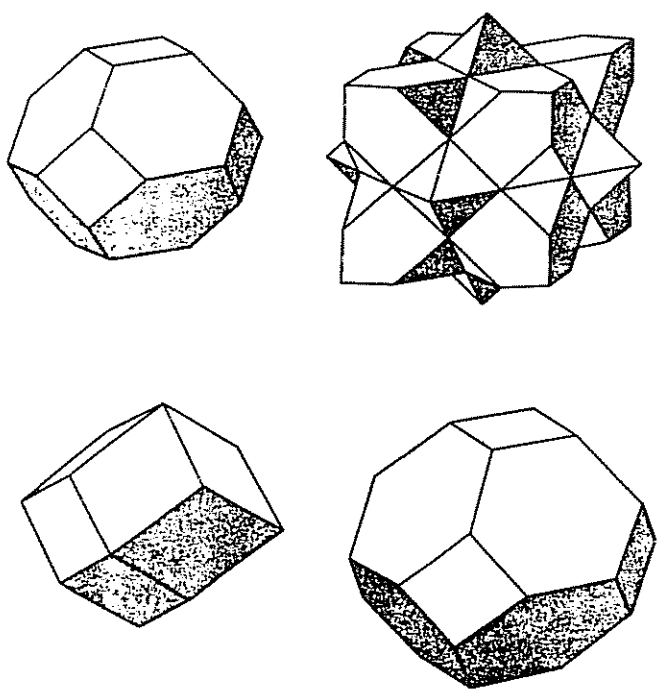


FIGURA 10-24 Primera y segunda zonas de Brillouin en: *a)* una estructura cúbica centrada en las caras y *b)* una estructura cúbica centrada en el cuerpo (ver Figs. 10-4 y 10-5).

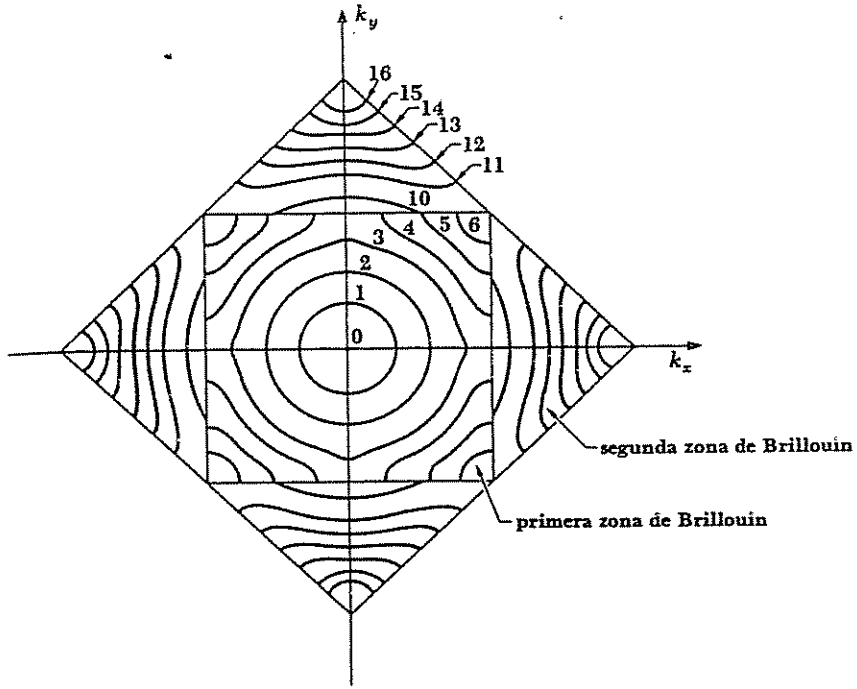


FIGURA 10-25 Contornos de energía en electrón-volts en la primera y segunda zonas de Brillouin de una red cuadrada hipotética.

espacio k bidimensional son sencillamente círculos k constantes, como en la Fig. 10-25. Al aumentar k, las líneas de contorno de energía constante se van aproximando progresivamente y se van distorsionando cada vez más. La razón del primer efecto es simplemente que E varía con k^2. La razón del segundo efecto es casi igualmente evidente. Cuanto más cerca se encuentra el electrón del límite de una zona de Brillouin en el espacio k, más cerca está de ser difractado por la red cristalina real. No obstante, en términos de partícula, ocurre difracción en virtud de la interacción del electrón con la ordenación periódica de iones positivos que ocupa los puntos de la red, y cuanto mayor es la interacción, más se altera la energía del electrón.

La Fig. 10-26 muestra cómo varía E con k en la dirección x. A medida que k se acerca a π/a, E aumenta más lentamente que $\hbar^2k^2/2m$, que es la figura de la partícula libre. A $k = \pi/a$, E tiene dos valores, el más bajo pertenece a la primera zona de Brillouin y el más alto a la segunda zona. Hay un espacio definido entre las energías posibles en la primera y segunda zonas de Brillouin que corresponde a la banda prohibida de la que se habló anteriormente. Se sigue el mismo modelo a medida que se alcanzan zonas de Brillouin superiores.

www.elsolucionario.org

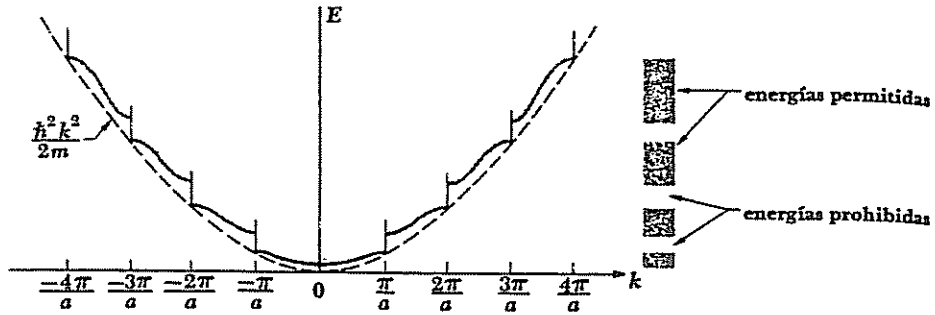


FIGURA 10-26 Energía de electrón E en función del número de onda k en la dirección k. La línea discontinua muestra cómo varía E con k para un electrón libre.

La discontinuidad de energía en el límite de una zona de Brillouin es consecuencia del hecho de que los valores limitantes de k corresponden a ondas estacionarias y no a ondas viajeras. Para mayor claridad, consideraremos que los electrones se mueven en la dirección x; la extensión de este concepto a otras direcciones es evidente. Cuando $k = \pm\pi/a$, como hemos visto, las ondas se reflejan hacia atrás y hacia adelante, de acuerdo con Bragg, y así las únicas soluciones de la ecuación de Schrödinger consisten en ondas estacionarias cuya longitud de onda es igual a la periodicidad de la red. Para $n = 1$, hay dos posibilidades de ondas estacionarias, es decir,

10.23 $$\psi_1 = A\text{sen}\ \frac{\pi x}{a}$$

10.24 $$\psi_2 = A\cos\frac{\pi x}{a}$$

Las densidades de probabilidad $|\psi_1|^2$ y $|\psi_2|^2$ se representan en la Fig. 10-27. Evidentemente, $|\psi_1|^2$ tiene su mínimo en los puntos de la red ocupados por los iones positivos, mientras que $|\psi_2|^2$ tiene su máximo en los puntos de la red. Como la densidad de carga correspondiente a la función de onda de un electrón ψ es $e|\psi|^2$, la densidad de carga en el caso de ψ_1 está concentrada *entre* los iones, mientras que en el caso de ψ_2 está concentrada *en* los iones positivos. La energía potencial de un electrón en una red de iones positivos es máxima en un punto equidistante a cada par de iones, y mínima en los iones mismos; por tanto, las energías electrónicas E_1 y E_2 asociadas con las ondas estacionarias ψ_1 y ψ_2 son diferentes. No hay otras soluciones posibles cuando $k = \pm\pi/a$, y, en consecuencia, ningún electrón puede tener energía entre E_1 y E_2.

La Fig. 10-28 muestra la distribución de energías electrónicas que corresponde a las zonas de Brillouin que se representan en la Fig. 10-25. A

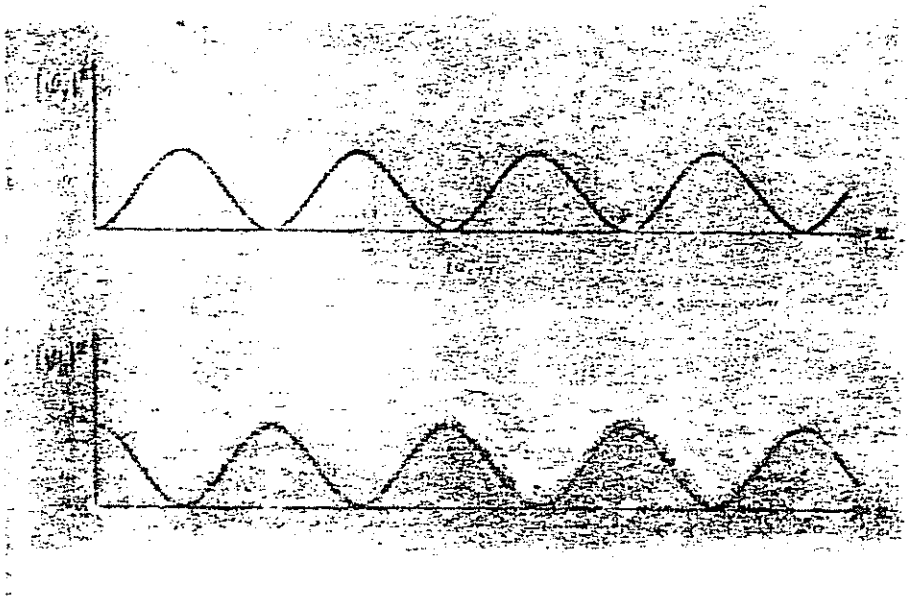


FIGURA 10-27 Distribución de las densidades de probabilidad $|\psi_1|^2$ y $|\psi_2|^2$.

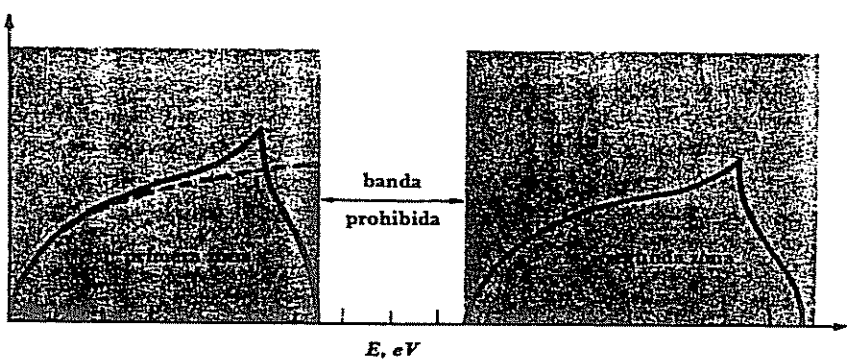


FIGURA 10-28 Distribuciones de las energías electrónicas en las zonas de Brillouin de la Fig.10-25. La línea discontinua es la distribución predicha por la teoría del electrón libre.

bajas energías (en la situación hipotética $E < \sim 2$ eV) la curva es casi la misma que la de la Fig. 10-20, que está basada en la teoría del electrón libre, lo que no es sorprendente, ya que a bajas energías, k es pequeña y entonces los electrones en una red periódica *se comportan* como electrones libres. Sin embargo, cuando aumenta la energía, el número de estados de energía disponibles es superior al de la teoría del electrón libre, debido a que la red distorsiona los contornos de energía: para cada energía hay más valores k diferentes. Así, cuando $k = \pm\pi/a$, los contornos de energía alcanzan los límites de la primera zona, y energías mayores de aproximadamente 4 eV (en este modelo particular) están prohibidas para electrones en las direcciones k_x y k_y, aunque son permitidas en otras direcciones. A medida que las energías van aumentando por arriba de 4 eV, los estados de energía disponibles se van restringiendo a los extremos de la zona, y $n(E)$ cae. Por último, aproximadamente a 6½ eV ya no hay estados y $n(E) = 0$. La energía más baja posible en la segunda zona es algo menor que 10 eV, y empieza otra curva similar en forma a la primera. Aquí, el espacio entre las energías posibles de las dos zonas es, aproximadamente, de 3 eV, y así la banda prohibida es, aproximadamente, de 3 eV de anchura.

Aunque debe haber una ruptura de energía entre zonas de Brillouin sucesivas en cualquier dirección dada, las diferentes rupturas pueden traslapar a las energías permitidas en otras direcciones, de manera que no existen bandas prohibidas en el cristal como conjunto. La Fig. 10-29 presenta gráficas de E en función de k para tres direcciones en un cristal que tiene una banda prohibida, y en un cristal cuyas bandas permitidas se traslapan lo suficiente para evitar que haya una banda prohibida.

El comportamiento eléctrico de un sólido depende del grado de ocupación de sus bandas de energía, así como de la naturaleza de la estructura de la banda, como se vio anteriormente. Hay dos estados de energía posibles (uno para cada spin) en cada banda para cada unidad de estructura del cristal. (Por "unidad de estructura" en este contexto se entiende un átomo en un metal o elemento sólido covalente como el diamante, una molécula en un sólido molecular, y un par de iones en un sólido iónico.) Un sólido será un aislante si se dan las dos siguientes condiciones: 1) debe tener un número par de electrones de valencia por unidad estructural, y 2) la banda que contiene los electrones de máxima energía debe quedar separada de la banda permitida superior a ella por una ruptura de energía grande en comparación con kT. La razón de la condición 1) es que asegura que la banda de máxima energía quede completamente llena, y la razón de la condición 2) es que ningún electrón pueda atravesar la ruptura para alcanzar estados que no estén llenos. Así, el diamante, con cuatro electrones de valencia por átomo, el hidrógeno sólido, con dos electrones de valencia por molécula H_2, y el NaCl, con ocho electrones de valencia por par de iones $Na^+ - Cl^-$, tienen todos además amplias bandas prohibidas y son aislantes. La Fig. 10-30*a* muestra los contornos de energía de un aislante hipotético.

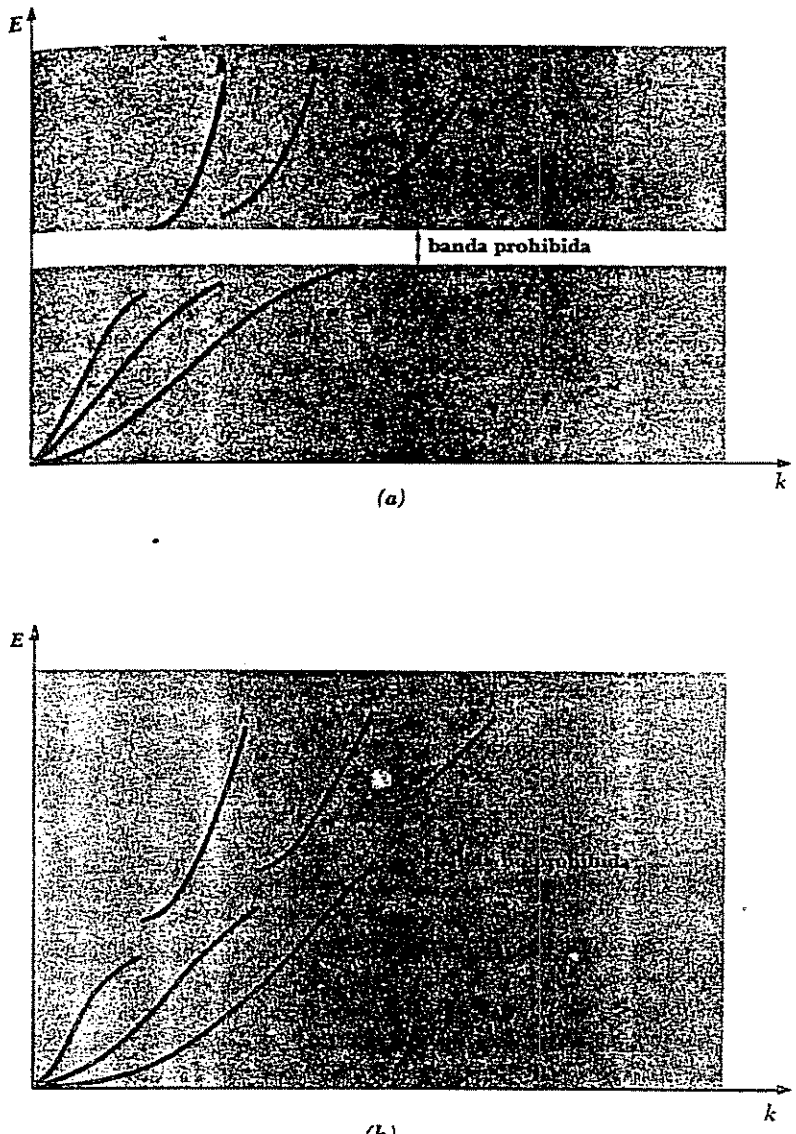


FIGURA 10-29 Curvas de E en fución de K para tres direcciones en dos cristales. En *a*) hay una banda prohibida, mientras que en *b*) las bandas de energía permitidas se superponen y no existe banda prohibida.

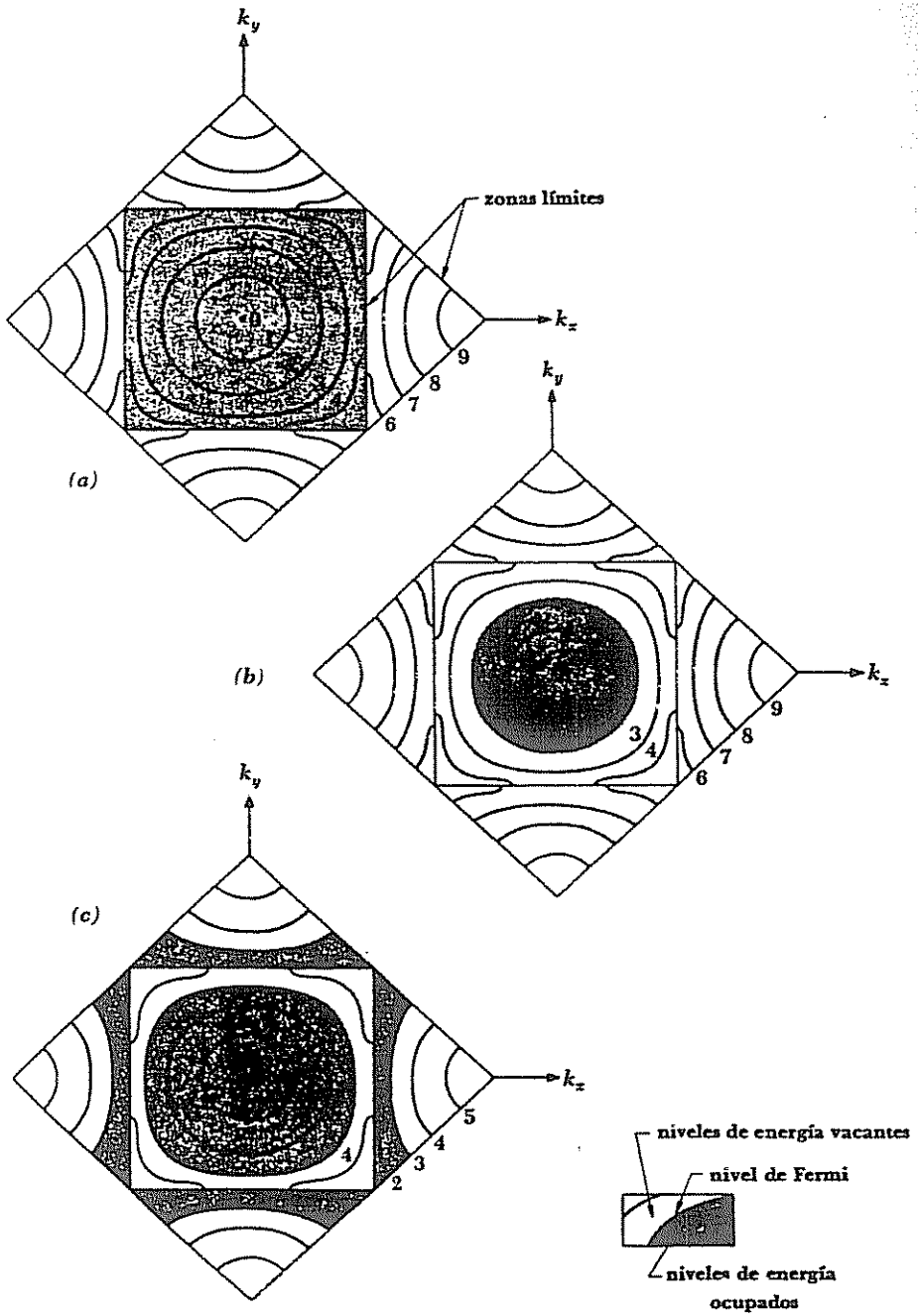


FIGURA 10-30 Contornos de energía electrónica y niveles de Fermi en tres tipos de sólidos: *a*) aislante; *b*) metal monovalente; *c*) metal divalente. Las energías están en electrón-volts.

Un conductor se caracteriza porque viola una (o ambas) de las condiciones señaladas arriba. Así, los metales alcalinos, que tienen números impares de electrones de valencia por unidad estructural (es decir, uno por átomo) son conductores, como también lo son los metales divalentes, como el magnesio y el cinc, cuyas bandas de energía se traslapan. La Fig. 10-30*b* y *c*, respectivamente, muestra los contornos de energía de estos dos tipos de metal. Cuando en un aislante la banda prohibida es estrecha o es pequeña la cantidad de traslapamiento en un metal, la conductividad eléctrica cae en la región de semiconducción y no es correcto decir que la sustancia es metal o no metal. El límite entre estados llenos y vacíos de energía electrónica en el espacio k tridimensional recibe el nombre de *superficie Fermi*.

Los experimentos indican que la conductividad de los metales divalentes berilio, cinc y cadmio, se debe ampliamente a portadores de carga positiva, no a electrones. Este hallazgo inesperado se explica fácilmente con base en la representación de bandas, considerando que el traslapamiento de la superficie de Fermi sobre la banda más alta es pequeña, dejando estados vacantes —que son huecos— en la banda inferior a ella. Los huecos de la banda más baja transportan el grueso de la corriente, mientras que los electrones en la banda más elevada juegan un papel menor.

10.11 LA MASA EFECTIVA

Un electrón en un cristal interactúa con la red cristalina y, debido a esta interacción, su respuesta a fuerzas externas no es, en general, la misma que la de un electrón libre. Este fenómeno no tiene nada de raro —ninguna partícula sujeta a restricciones se comporta como una partícula libre. Lo que *no es* usual es que las desviaciones del comportamiento a partir de un electrón en un cristal de un electrón libre, bajo la influencia de fuerzas externas, se puedan explicar todas en base a la sencilla afirmación de que la *masa efectiva* de dicho electrón no es la misma que su masa real.

Los resultados más importantes de la teoría del electrón libre de los metales, que se estudió en las Secciones 10.7 y 10.8, se pueden incorporar a la teoría más realista de bandas, sustituyendo simplemente la masa m del electrón por la masa efectiva promedio m^* en la superficie Fermi. Así, la energía Fermi en un metal está dada por

$$10.25 \qquad u_F = \frac{h^2}{2m^*}\left(\frac{3N}{8\pi V}\right)^{2/3} \qquad \text{Energía de Fermi}$$

donde N/V es la densidad de electrones de valencia. La Tabla 10.5 es una lista de relaciones de masa efectiva m^*/m en los metales.

www.elsolucionario.org

Tabla 10.5

Relaciones de masa efectiva m^*/m en la superficie Fermi en algunos metales

Metal		m^*/m
Litio	Li	1.2
Berilio	Be	1.6
Sodio	Na	1.2
Aluminio	Al	0.97
Cobalto	Co	14
Níquel	Ni	28
Cobre	Cu	1.01
Cinc	Zn	0.85
Plata	Ag	0.99
Platino	Pt	13

Problemas

1. ¿Qué efecto tienen sobre la energía de cohesión de los cristales iónicos y covalentes, *a*) las fuerzas de van der Waals y *b*) las oscilaciones punto-cero de los iones y los átomos en torno a sus posiciones de equilibrio?

2. La atracción de van der Waals entre dos átomos de He conduce a una energía de enlace de aproximadamente 6×10^{-5} eV a una separación de equilibrio de 3 XI aproximadamente. Con base en el principio de incertidumbre, demostrar que, a presiones ordinarias ($<$25 atm), no existe el sólido He.

3. El *efecto Joule-Thomson* se refiere a la caída de temperatura que experimenta un gas cuando pasa lentamente de un recipiente lleno a uno vacío a través de un tapón poroso. Como la expansión se efectúa dentro de un recipiente rígido, no se lleva a cabo ningún trabajo mecánico. Explicar el efecto Joule-Thomson en función de la atracción de van der Waals entre moléculas.

4. Las distancias entre iones y los puntos de fusión de las sales de sodio son los siguientes:

	NaF	NaCl	NaBr	NaI
Distancia entre iones, Å	2.3	2.8	2.9	3.2
Punto de fusión, °C	988	801	740	660

Explicar la variación de estas cantidades con el número atómico del halógeno.

5. Utilizar la noción de bandas de energía para explicar las siguientes propiedades ópticas de los sólidos: *a*) Todos los metales son opacos a la luz de todas las longitudes de onda. *b*) Los semiconductores son transparentes a la luz infrarroja, aunque opacos a la luz visible. *c*) La mayoría de los aislantes son transparentes a la luz visible.

6. La ruptura de energía en el silicio es 1.1 eV, y en el diamante es 6 eV. Estudiar la transparencia de estas sustancias a la luz visible.

7. Una pequeña proporción de indio se incorpora a un cristal de germanio. ¿Será el cristal un semiconductor tipo n o tipo p?

8. Una pequeña proporción de antimonio se incorpora a un cristal de germanio. ¿Será el cristal un semiconductor tipo n o tipo p?

9. ¿Qué relación hay entre el hecho de que los electrones libres de un metal cumplan la estadística de Fermi y el de que el efecto fotoeléctrico sea virtualmente independiente de la temperatura?

10. *a*) ¿Cuánta energía se requiere para formar un par de iones K^+ e I^- a partir de un par de estos átomos? *b*) ¿Cuál debe ser la separación entre los iones K^+ e I^- para que su energía total sea cero?

11. *a*) ¿Cuánta energía se requiere para formar un par de iones Li^+ y Br^- a partir de un par de estos átomos? *b*) ¿Cuál debe ser la separación entre los iones Li^+ y Br^- para que su energía total sea cero?

12. Demuestre que los cinco primeros términos en la serie de la constante de Madelung del NaCl son

$$\alpha = 6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{2} + \frac{24}{\sqrt{5}} - \cdots$$

13. *a*) La energía de ionización del potasio es 4.34 eV y la afinidad electrónica del cloro es 3.61 eV. La constante de Madelung para la estructura KCl es 1.748 y la distancia entre los iones de signo opuesto es 3.14 Å. Con base únicamente en estos datos, calcular la energía de cohesión del KCl. *b*) La energía de cohesión del KCl observada es 6.42 eV por par. Considerando que la diferencia entre esta imagen y la obtenida en *a*) se debe a la repulsión del principio de exclusión, hallar el exponente n en la fórmula Br^{-n} para la energía potencial que surge de esta fuente.

14. Repetir el problema 13 para el LiCl cuya constante de Madelung es 1.748, la distancia entre iones es 2.57 Å, y la energía de cohesión observada es 6.8 por par de iones. La energía de ionización del Li es 5.4 eV.

15. La energía potencial $V(x)$ de un par de átomos en un sólido, cuando están desplazados por la distancia x de su separación de equilibrio a 0° K, vale $V(x) = ax^2 - bx^3 - cx^4$, donde los términos armónicos $-bx^3$ y $-cx^4$ representan respectivamente la asimetría introducida por las fuerzas de repulsión entre los átomos y la nivelación de las fuerzas de atracción para grandes desplazamientos. A una temperatura T, la probabilidad de que se produzca un desplazamiento x con relación a la probabilidad de que no se produzca es $e^{-V/kT}$, de forma que el desplazamiento medio x a esa temperatura es

$$\bar{x} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-V/kT}\,dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-V/kT}\,dx}$$

Demostrar que, para pequeños desplazamientos, $\bar{x} \approx 3bkT/4a^2$. (Por esta razón, la variación de longitud de un sólido con respecto a la temperatura es proporcional a ΔT.)

16. La energía de Fermi en el cobre es 7.04 eV. *a*) Aproximadamente, ¿qué porcentaje de los electrones libres del cobre se encuentran en estados excitados a la temperatura ambiente? *b*) ¿Al punto de fusión del cobre, 1083° C?

17. La energía de Fermi en la plata es 5.51 eV. *a*) ¿Cuál es la energía promedio de los electrones libres en la plata a 0° K? *b*) ¿Qué temperatura es necesaria para que la energía molecular media en un gas ideal tenga este valor? *c*) ¿Cuál es la velocidad de un electrón con esta energía?

18. La densidad del aluminio es 2.70 g/cm³ y su peso atómico es 26.97. La estructura electrónica del aluminio se da en la Tabla 7.2 (nota: la diferencia de energía entre electrones $3s$ y $3p$ es muy pequeña), y la masa efectiva de un electrón en el aluminio es 0.97 m_e. Calcular la energía de Fermi en el alumnio.

19. La densidad del cinc es 7.13 g/cm³ y su peso atómico es 65.4. La estructura atómica del cinc se da en la tabla 7.2 y la masa efectiva de un electrón en el cinc es 0.85 m_e. Calcular la energía de Fermi en el cinc.

20. Explicar por qué los electrones libres de un metal contribuyen en poca medida a su calor específico.

21. Hallar la razón entre las energías cinéticas de un electrón en una red cuadrada bidimensional que tiene $k_x = k_y = \pi/a$ y un electrón que tiene $k_x = \pi/a$, $k_y = 0$.

22. Trazar la tercera zona de Brillouin de la red cuadrada bidimensional cuyas primeras dos zonas de Brillouin se muestran en la Fig. 10-23.

23. Si en una muestra de germanio hay fósforo, considerar que cada uno de sus cinco electrones de valencia gira en una órbita de Bohr en torno a cada ion P^+ en la red de germanio. *a*) Si la masa efectiva del electrón es 0.17 m_e y la constante dieléctrica del germanio es 16, hallar el radio de la primera órbita de Bohr del electrón. *b*) La ruptura de energía entre las bandas de valencia y de conducción en el germanio es 0.65 eV. ¿Cómo se compara la energía de ionización del electrón anterior con esta energía y con kT a la temperatura ambiente?

24. Repetir el Problema 23 para una muestra de silicio que contenga arsénico. La masa efectiva de un electrón en el silicio es, aproximadamente, 0.31 m_e, la constante dieléctrica del silicio es 12 y la ruptura de energía en el silicio es 1.1 eV.

25. En el cálculo de la energía de Fermi en el cobre, que se llevó a cabo en la Sec. 10.7, se consideró la diferencia entre m_e y m_e^*, y así el valor u_F obtenido fue aproximadamente correcto. ¿Por qué?

26. La masa efectiva m^* de un portador de corriente en un semiconductor se puede determinar directamente por medio de un experimento de resonancia de ciclotrón en el cual los portadores (ya sean electrones o huecos) se mueven en órbitas espirales en torno a la dirección de un campo magnético **B** aplicado externamente. Se aplica un campo eléctrico alterno perpendicular a **B** y se presenta una absorción resonante de energía cuando su frecuencia ν es igual a la frecuencia de revolución ν_c del portador. *a*) Deducir una ecuación para ν_c en función de m^*, e, y B. *b*) En un determinado experimento, $B = 0.1$ T y se encuentra que el máximo de absorción se presenta a $\nu = 1.4 \times 10^{10}$ Hz. Hallar m^*. *c*) Hallar el radio del orbital máximo de un portador de carga en este experimento que tenga una velocidad de 3×10^4 m/s.

EL NUCLEO 4

www.elsolucionario.org

EL NUCLEO ATOMICO 11

Hasta ahora nos hemos referido al núcleo como si fuera un punto con una masa cargada positivamente. El comportamiento de los electrones atómicos es la causa de las principales propiedades de los átomos (excepto la masa), las moléculas y los sólidos, y no el comportamiento de los núcleos atómicos. Pero el núcleo en sí está lejos de ser insignificante en el gran esquema de las cosas. Por ejemplo, los elementos existen debido a la capacidad de los núcleos de poseer cargas eléctricas múltiples, y el principal problema de la física nuclear es explicar esta capacidad. Además, la energía que impulsa a la evolución continua del universo aparentemente se puede atribuir a reacciones y transformaciones nucleares. Y, por supuesto, las aplicaciones de la energía nuclear nos son muy comunes.

11.1 MASAS ATOMICAS

El núcleo de un átomo contiene prácticamente toda su masa, y una gran cantidad de información sobre las propiedades del núcleo se puede deducir del conocimiento de las masas atómicas. El instrumento que se utiliza para medir masas atómicas recibe el nombre de *espectrómetro de masa*. Los espectrómetros y las técnicas modernas son capaces de medir con una precisión mayor que 1 parte de 10^6.

Las masas atómicas expresan las masas de átomos neutros, no de núcleos desnudos. Así, las masas de los electrones orbitales y el equivalente de masa de sus energías de enlace se incorporan en las figuras. Las masas atómicas se expresan convencionalmente en *unidades de masa* (u), de modo que la masa del tipo más abundante de átomos de carbono es, por definición, exactamente 12.000...u. El valor de una unidad de masa es, con cinco cifras significativas,

$$1\,\text{u} = 1.6604 \times 10^{-27}\,\text{kg}$$

y su equivalente en energía es 931.48 MeV.

Poco después de que se desarrollaron los métodos para determinar masas atómicas, a principios de este siglo, se descubrió que no todos los átomos de un elemento particular poseían la misma masa. Las diferentes variedades del mismo elemento reciben el nombre de *isótopos*. Otro término que se utiliza ampliamente, *núclido*, se refiere a una especie particular de núcleo; así, cada isótopo de un elemento es un núclido.

Las masas atómicas que se listan en la Tabla 7.1 se refieren a la masa atómica promedio de cada elemento, que es la cantidad importante para los químicos. La Tabla 11.1 contiene las masas atómicas y las cantidades relativas de los cinco isótopos estables del cinc. Las masas individuales oscilan entre 63.92914 u y 69.92535 u, y las cantidades relativas oscilan entre 0.62% y 48.89%. La masa promedio es de 65.38 u, que es la masa atómica del cinc. Veinte elementos se componen cada uno de un único núclido; como ejemplos tenemos el berilio, el flúor, el sodio y el aluminio.

Se ha encontrado que incluso el hidrógeno tiene isótopos, aunque los dos más pesados constituyen, aproximadamente, sólo el 0.015% del hidrógeno natural. Sus masas atómicas son 1.007825, 2.014102 y 3.01605 u; los isótopos más pesados se conocen respectivamente como *deuterio* y *tritio*. (Los núcleos del tritio, denominados *tritones*, son inestables y se desintegran radiactivamente, formando así isótopos de helio.) El nucleo del isótopo más ligero es el *protón*, cuya masa de

$$\begin{aligned} m_p &= 1.0072766 \text{ u} \\ &= 1.6725 \times 10^{-27} \text{ kg} \end{aligned}$$

es, dentro del error experimental, igual a la masa del átomo completo menos la masa del electrón que contiene. El protón, como el electrón, es una partícula elemental en lugar de un compuesto de otras partículas. (La noción de partícula elemental se estudia con detalle en el capítulo 13.)

En las listas de masas de los núclidos observamos una regularidad interesante: los valores están siempre muy cerca de ser múltiplos enteros de la masa del átomo de hidrógeno, 1.007825 u. Por ejemplo, el átomo de deuterio tiene una masa aproximadamente igual al doble de la del átomo de hidrógeno, y el átomo de tritio la tiene tres veces más pesada. Las masas de los isótopos del cinc que se listan en la Tabla 11.1 ilustran ampliamente este patrón, siendo casi 64, 66, 67, 68 y 70 veces

Tabla 11.1
PROPIEDADES DE LOS ISOTOPOS ESTABLES DEL CINC, $Z = 30$

Número de masa del isótopo	Masa atómica, u	Abundancia relativa, %
64	63.92914	48.89
66	65.92605	27.81
67	66.92715	4.11
68	67.92486	18.56
70	69.92535	0.62

la masa del átomo de hidrógeno. En consecuencia, es tentador considerar que todos los núcleos constan de protones —núcleos de hidrógeno— enlazados de alguna manera. Sin embargo, una observación más detallada descarta esta noción, ya que la masa de un núclido es invariablemente mayor que la masa de un número de átomos de hidrógeno igual a su número atómico Z— y la carga nuclear de un átomo es $+Ze$. El número atómico del cinc es 30, pero todos sus isótopos tienen masas iguales a más del doble que las de 30 átomos de hidrógeno.

Se nos ocurre otra posibilidad. Tal vez los electrones puedan estar presentes en los núcleos, neutralizando así la carga positiva de algunos de los protones. Así, el núcleo de helio, que tiene una masa cuatro veces mayor que la del protón, aunque su carga es de solamente $+2e$, se podría considerar que está compuesto de cuatro protones y dos electrones. Esta explicación está confirmada por el hecho de que ciertos núcleos radiactivos emiten electrones espontáneamente, fenómeno que se conoce como *desintegración beta*, que se explica fácilmente si hay electrones en el núcleo.

A pesar de lo interesante de esta hipótesis, hay, sin embargo, una serie de fuertes argumentos en contra de ella. Estos argumentos son:

1. *El tamaño del núcleo.* Los núcleos tienen un diámetro de sólo $\sim 10^{-14}$ m. Confinar un electrón en un espacio tan pequeño exige, de acuerdo con el principio de incertidumbre, una indeterminación en su momentum de $\Delta p \geqslant 1.1 \times 10^{-20}$ kg-m/s, como se calculó en la Sec. 3.7. El momentum del electrón debe ser, por lo menos, tan grande como el valor mínimo de Δp. La energía cinética del electrón que corresponde a un momentum de 1.1×10^{-20} kg-m/s es 21 MeV. (Se puede obtener también esta cifra calculando el nivel de energía mínima de un electrón en una caja de dimensiones nucleares; como $T \gg m_0c^2$, el último cálculo se debe hacer en forma relativista.) Sin embargo, los electrones emitidos durante la desintegración beta tienen energías de solamente 2 ó 3 MeV —un orden de magnitud menor que las energías que debieran haber tenido dentro del núcleo si hubieran existido ahí.

Debemos notar que el principio de incertidumbre conduce a un resultado muy diferente cuando se aplica a protones dentro de un núcleo. Para un protón que tiene un momentum de 1.1×10^{-20} kg-m/s, $T \ll m_0c^2$, y su energía cinética se puede calcular mediante procedimientos clásicos. Tenemos

$$\begin{aligned} T &= \frac{p^2}{2m} \\ &= \frac{(1.1 \times 10^{-20} \text{ kg-m/s})^2}{2 \times 1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}} \\ &= 3.6 \times 10^{-14} \text{ J} \\ &= 0.23 \text{ MeV} \end{aligned}$$

La presencia de protones con estas energías cinéticas en un núcleo es completamente plausible.

2. *El spin nuclear.* Los protones y los electrones son partículas de Fermi con spines de $\frac{1}{2}$, esto es, con momentum angular de $\frac{1}{2}\hbar$. Así, los núcleos que tuvieran un número par de protones y electrones tendrían spines enteros, mientras que los que tuvieran este número impar tendrían spines semienteros. Esta predicción no se cumple. El hecho de que el deuterón, que es el núcleo de un isótopo del hidrógeno, tenga un número atómico de 1 y una masa de 2, podría interpretarse como que hay dos protones y un electrón. De acuerdo con las orientaciones de las partículas, el spin nuclear del ${}^{2}_{1}\mathrm{H}$ sería $\frac{3}{2}$, $\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}$ o $-\frac{3}{2}$. Sin embargo, el spin observado en el deuterón es 1, lo que no concuerda con la hipótesis de los electrones nucleares.

3. *El momento magnético.* El protón tiene un momento magnético aproximado de sólo 1.5×10^{-3} que el del electrón, de manera que los momentos magnéticos nucleares deben ser del mismo orden de magnitud que el del electrón si existen electrones en los núcleos. Sin embargo, los momentos magnéticos de los núcleos observados son comparables con el del protón, no con el del electrón. Esta discrepancia no se puede comprender si los electrones son constituyentes del núcleo.

4. *La interacción electrón-núcleo.* Se ha observado que las fuerzas que actúan entre las partículas del núcleo dan lugar a energías de enlace del orden de 8 MeV por partícula. Es difícil ver por qué, si los electrones actúan fuertemente sobre los protones para formar núcleos, los electrones orbitales en un átomo interactúan sólo electrostáticamente con su núcleo. Es decir, ¿cómo pueden la mitad de los electrones de un átomo escapar al fuerte enlace de la otra mitad? Además, cuando electrones rápidos son dispersados por los núcleos, se comportan como si actuaran sólo por fuerzas electrostáticas, mientras que la dispersión nuclear de protones rápidos revela desviación de las influencias electrostáticas, que solamente pueden ser adscritas a una fuerza específicamente nuclear.

Las dificultades de la hipótesis de los electrones nucleares fueron conocidas durante algún tiempo antes de que apareciera la explicación correcta de las masas nucleares. Pero entonces no pareció que fuese una seria alternativa. El problema de los misteriosos constituyentes, además del protón en el núcleo atómico, no se resolvió hasta 1932.

11.2 EL NEUTRON

La composición de los núcleos atómicos se comprendió finalmente en 1932. Dos años antes, los físicos alemanes W. Bothe y H. Becker bombardearon berilio con partículas alfa obtenidas del polonio, y encontraron que la radiación emitida era capaz de penetrar fácilmente la materia. Bothe y Becker investigaron que la radiación no estaba formada por partículas cargadas y supusieron con toda lógica, que estaba constituida por rayos gamma. (Los rayos gamma son ondas electromagnéticas de longitud de onda extremadamente corta.) La capacidad de la radiación para atravesar varios centímetros de plomo sin ser absorbida sugirió que los rayos gamma tenían una longitud de onda muy corta. Otros físicos se interesaron por esta radiación y realizaron una serie de experimentos para determinar sus propiedades con detalle. En uno de ellos, Irene Curie y F. Joliot observaron que cuando la radiación incide sobre parafina (sustancia rica en hidrógeno) se producen protones. A primera vista, esto no es muy sorprendente: los rayos X pueden dar energía a los electrones en los choques Compton y no hay razón, por tanto, para pensar que los rayos gamma, de longitud de onda más corta, no puedan proporcionar también energía a los protones de una manera similar.

Curie y Joliot encontraron energía de retroceso del protón hasta de 5.3 MeV. A partir de la Ec. 2.15 del efecto Compton, podemos calcular la energía mínima del fotón de rayos gamma, $E = h\nu$, necesaria para trasmitir la energía cinética T al protón. El resultado es una energía de fotón de rayos gamma inicial mínima de 53 MeV. Este resultado pareció raro, porque hasta ese momento no se conocía ninguna radiación nuclear que tuviera más de una pequeña fracción de esta energía tan considerable. Fue aún más sorprendente cuando se calculó que la reacción supuesta de una partícula alfa y un núcleo de berilio para encontrar un núcleo de carbono daría como resultado una disminución de masa de 0.01144 u, equivalente a sólo 10.7 MeV, que un quinto de la energía que necesitaría un fotón de rayos gamma para extraer de la parafina protones de 5.3 MeV.

En 1932, James Chadwick, colaborador de Rutherford, propuso otra hipótesis para la misteriosa radiación emitida por el berilio al bombardearlo con partículas alfa. Supuso que la radiación está formada por *partículas* neutras cuya masa es, aproximadamente, la misma que la del protón. La neutralidad eléctrica de estas partículas, llamadas *neutrones*, explica su facilidad para penetrar en la materia. Su masa explica claramente la energía de retroceso del protón: una partícula que se mueve y choca con otra en reposo, cuya masa sea igual, puede trasmitir toda su energía cinética a esta última. Una energía máxima del protón de 5.3 MeV supone una energía del neutrón de 5.3 MeV. No se trata ya de los 53 MeV que necesita un rayo gamma para producir el mismo efecto. Otros experimentos han demostrado que núcleos ligeros, como los de helio, carbono y nitrógeno, podrían también extraerse de absorbentes apropiados por la radiación del berilio, y las mediciones de las energías de estos núcleos coinciden con la hipótesis del neutrón. De hecho, Chadwick obtuvo la masa del neutrón $m_n \approx m_p$ a partir de un análisis de las energías de retroceso observadas en los núcleos de nitrógeno y en el protón; ninguna otra masa dio una concordancia mayor con los datos experimentales.

Antes de considerar el papel del neutrón en la estructura del núcleo, notemos que no es una partícula estable fuera de él. La desintegración radiactiva de los neutrones libres da un protón, un electrón y un antineutrino; la vida media del neutrón libre es de 10.8 min.

Inmediatamente después de su descubrimiento, el neutrón fue reconocido como el ingrediente perdido del núcleo atómico. Su masa de

$$\begin{aligned} m_n &= 1.0086654 \text{ u} \\ &= 1.6748 \times 10^{-27} \text{ kg} \end{aligned}$$

que es ligeramente mayor que la del protón, su neutralidad eléctrica y su spin de $\frac{1}{2}$ concuerdan perfectamente con las propiedades observadas del núcleo si se supone que está compuesto solamente de neutrones y protones.

www.elsolucionario.org

Los términos que siguen se emplean frecuentemente para describir un núcleo:

Z = número atómico = número de protones
N = número neutrónico = número de neutrones
$A = Z + N$ = número de masa = número total de neutrones y protones

El término *nucleón* se emplea al mismo tiempo para los protones y los neutrones, de modo que el número másico o de masa A es el número de nucleones que hay en un átomo determinado. Los núclidos se identifican de acuerdo con el esquema

$${}^{A}_{Z}\mathrm{X}$$

donde X es el símbolo de la especie química. Así, el isótopo del arsénico de número de masa 75 se representa mediante:

$${}^{75}_{33}\mathrm{As}$$

ya que el número atómico del arsénico es 33. Del mismo modo, un núcleo de hidrógeno ordinario (un protón) es:

$${}^{1}_{1}\mathrm{H}$$

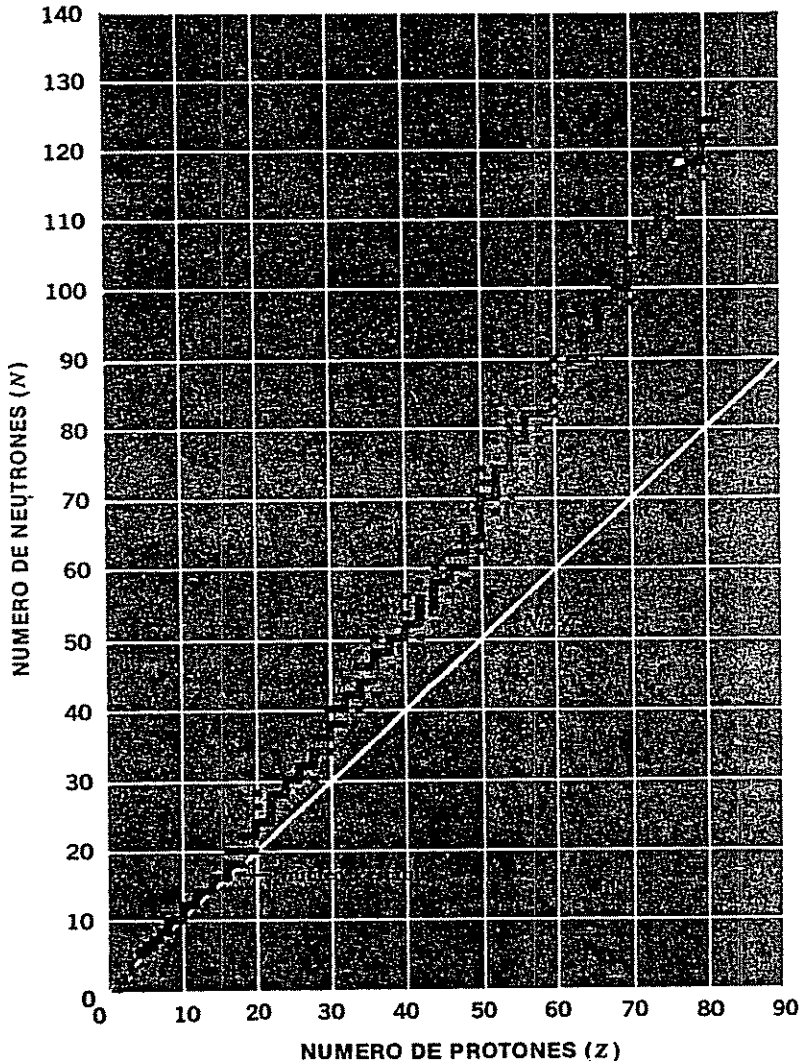
Aquí el número atómico y el de masa son el mismo, ya que no hay ningún neutrón.

El hecho de que los núcleos estén formados por neutrones y protones explica inmediatamente la existencia de isótopos: los isótopos de un elemento contienen todos el mismo número de protones, pero tienen diferente número de neutrones. Puesto que la carga nuclear es, en último término, el origen de las propiedades características de un átomo, los isótopos de un elemento tienen idéntico comportamiento químico y difieren físicamente sólo en la masa.

11.3 LOS NUCLEOS ESTABLES

No todas las combinaciones de neutrones y protones forman núcleos estables. En general, los núcleos ligeros ($A < 20$) contienen aproximadamente igual número de neutrones que de protones, mientras que en los núcleos más pesados la proporción de neutrones se va haciendo progresivamente mayor. Esto resulta evidente en la Fig. 11-1, que es la representación de N en función de Z para núcleos estables. La tendencia de N a igualar Z es consecuencia de la existencia de niveles de energía nucleares, cuyos origen y propiedades examinaremos brevemente. Los nucleones, que tienen spines de $\frac{1}{2}$, obedecen al principio de exclusión. En consecuencia, cada nivel de energía nuclear puede contener dos neutrones de spines opuestos y dos protones de spines opuestos. Los niveles de energía en los núcleos se llenan de acuerdo a una secuencia, igual que los niveles de energía en los átomos, para lograr configuraciones de un mínimo de energía y, por ello, un máximo de estabilidad. Por ejemplo, un núcleo con tres neutrones y un protón exterior y los niveles interiores llenos tendrá más energía que uno que tenga dos neutrones y dos protones en la misma situación, ya que en el primer caso uno de los

FIGURA 11-1 Diagrama neutrón-protón para núcleos estables. No hay núclidos estables cuando $Z = 43$ o 61, cuando $N = 19, 35, 39, 45, 61, 89, 115$ o 126, o cuando $A = Z + N = 5$ u 8. Todos los núclidos con $Z > 83$, $N > 126$ y $A > 209$ son inestables.



neutrones debe alcanzar un nivel de energía más elevado, mientras que en el segundo caso los cuatro nucleones caben en el nivel más bajo disponible. La Fig. 11-2 muestra cómo esta noción explica la ausencia de un isótopo estable ${}^{12}_{5}\mathrm{B}$, mientras que permite la existencia de ${}^{12}_{6}\mathrm{C}$.

El argumento anterior constituye sólo una parte del estudio. Los protones están cargados positivamente y se repelen entre sí electrostáticamente. Esta repulsión es tan grande en núcleos con más de 10 protones que para que exista estabilidad se requiere un exceso de neutrones que producen únicamente fuerzas de atracción; así, la curva de la Fig. 11-1 se separa cada vez más de la línea $N = Z$ a medida que Z aumenta. Aun en núcleos ligeros, N puede exceder a Z, pero nunca es menor; ${}^{11}_{5}\mathrm{B}$ es estable, por ejemplo, pero ${}^{11}_{6}\mathrm{C}$ no lo es.

Las fuerzas nucleares tienen un margen limitado y en consecuencia los nucleones interactúan sólo fuertemente con sus vecinos más próximos. A este efecto se le conoce como *saturación* de fuerzas nucleares. Debido a que la repulsión de Coulomb de los protones es apreciable en todo el núcleo, existe un límite en la capacidad que tienen los neutrones para evitar la desintegración de un núcleo grande. Este límite está representado por el isótopo del bismuto ${}^{209}_{83}\mathrm{Bi}$, que es el núclido estable más pesado. Todos los núcleos con $Z > 83$ y $A > 209$ se transforman espontáneamente en otros más ligeros por medio de la emisión de una o varias partículas alfa, que son núcleos ${}^{4}_{2}\mathrm{He}$. Como una partícula alfa consta de dos protones y dos neutrones, una desintegración alfa reduce en dos la Z y la N del núcleo original. Si el núcleo resultante tiene una relación neutrón/protón demasiado pequeña o demasiado grande para ser estable, puede haber desintegración beta para obtener una configuración más apropiada. En desintegración beta negativa un neutrón se transforma en un protón y un electrón:

$$n \rightarrow p + e^{-}$$

El electrón abandona al núcleo y es observado como una "partícula beta". En la desintegración beta positiva, un protón se convierte en un neutrón y se emite un positrón:

$$p \rightarrow n + e^{+}$$

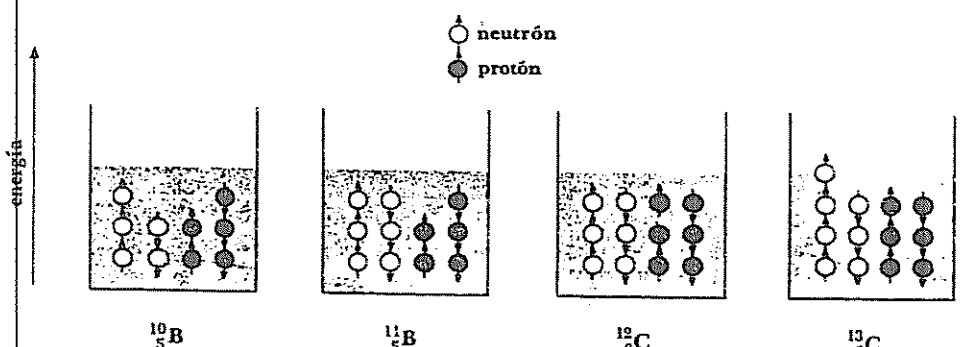


FIGURA 11-2 Diagramas simplificados de niveles de energía del boro estable y de isótopos del carbono. El principio de exclusión limita la ocupación de cada nivel a dos neutrones de spin opuesto y a dos protones de spin opuesto.

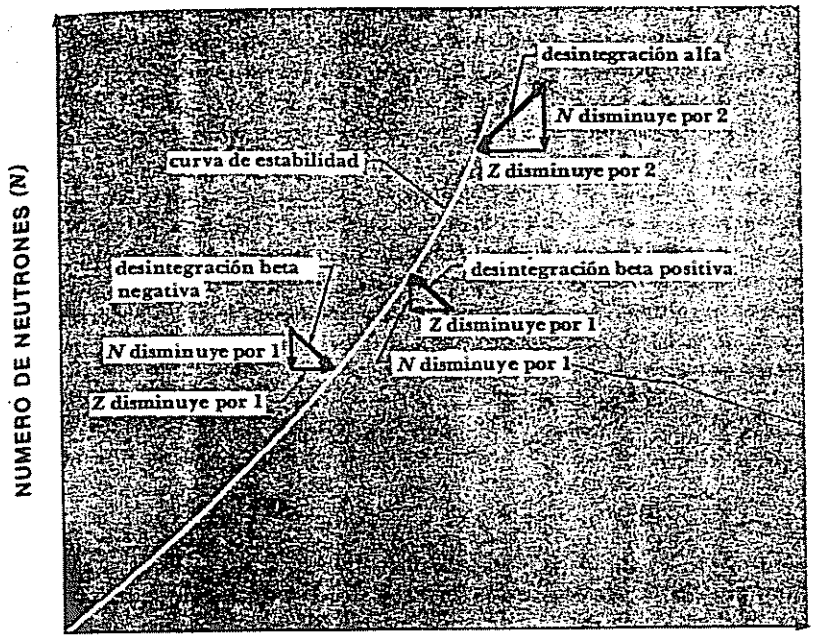


FIGURA 11-3 Las desintegraciones alfa y beta permiten que un núcleo inestable alcance una configuración estable.

Así, la desintegración beta negativa disminuye la proporción de neutrones y la desintegración beta positiva la incrementa. La Fig. 11-3 muestra cómo las desintegraciones alfa y beta permiten alcanzar la estabilidad. La radiactividad se estudia con mayor detalle en el Cap. 12.

11.4 LOS TAMAÑOS Y LAS FORMAS NUCLEARES

El experimento de dispersión de Rutherford suministró la primera prueba de que los núcleos son de tamaño finito. En aquel experimento, según se vio en el Cap. 4, una partícula alfa incidente es reflejada por un núcleo de acuerdo con la ley de Coulomb, siempre y cuando la distancia entre ellos exceda de unos 10^{-14} m. Para separaciones más pequeñas no se cumple la ley de Coulomb porque el núcleo no se presenta como una carga puntual frente a la partícula alfa.

Desde los tiempos de Rutherford se han realizado diversos experimentos para determinar las dimensiones del núcleo con dispersión de partículas, una técnica hasta ahora válida. Para este fin, son ideales los electrones rápidos y los neutrones, ya que un electrón interactúa con un núcleo sólo a través de fuerzas eléctricas

mientras que un neutrón sólo interactúa específicamente a través de fuerzas nucleares. Así, la dispersión de electrones proporciona información sobre la distribución de carga en un núcleo, y la dispersión de neutrones proporciona información sobre la distribución de la materia nuclear. En ambos casos, la longitud de onda de De Broglie de la partícula debe ser menor que el radio del núcleo en estudio (ver Probl. 3 del Cap. 3).

En experimentos reales sobre los tamaños de los núcleos se han utilizado electrones desde varios cientos de MeV, hasta más de 1 GeV (1 GeV = 1,000 MeV = 10^9 eV) y neutrones de 20 MeV y más. En cada caso se ha encontrado que el volumen de un núcleo es directamente proporcional al número de nucleones que contiene, que es su número de masa A. Si el radio nuclear es R, el volumen correspondiente es $\frac{4}{3}\pi R^3$ y así R^3 es proporcional a A. Normalmente esta relación se expresa en la forma inversa

11.1 $$R = R_0 A^{1/3}$$ Radios nucleares

El valor de R_0 es

$$R_0 \approx 1.2 \times 10^{-15}\ \text{m}$$

La indeterminación de R_0 no es consecuencia del error experimental, sino del carácter diferente de los diversos experimentos: electrones y neutrones interactúan con los núcleos en forma diferente. El valor de R_0 es ligeramente menor cuando se deduce de la dispersión de electrones, lo que implica que la materia nuclear y la carga nuclear no se distribuyen idénticamente en torno al núcleo.

Como vimos en partes anteriores de este libro, la unidad angstrom (1 Å = 10^{-10} m) es una unidad de longitud conveniente para expresar distancias en el campo atómico. Por ejemplo, el radio del átomo de hidrógeno es 0.53 Å, los átomos de C y O en una molécula de CO se encuentran a una distancia de 1.15 Å y los iones Na^+ y Cl^- en el cristal de NaCl se encuentran a una distancia de 2.81 Å. Los núcleos son tan pequeños que los *fermi* (fm), 10^{-5} el tamaño de un angstrom, es una unidad de longitud adecuada:

$$1\ \text{fermi} = 1\ \text{fm} = 10^{-15}\ \text{m}$$

Por tanto, podemos escribir

11.2 $$R \approx 1.2\, A^{1/3}\ \text{fm}$$

para radios nucleares. De esta fórmula deducimos que el radio del núcleo de $^{12}_{6}C$ es

$$R \approx 1.2 \times (12)^{1/3}\ \text{fm} \approx 2.7\ \text{fm}$$

De una manera similar, el radio del núcleo del $^{107}_{47}Ag$ es 5.7 fm y el del núcleo del $^{238}_{92}U$ es 7.4 fm.

Ahora que conocemos tanto los tamaños como las masas nucleares podemos calcular la densidad de la materia nuclear. En el caso del $^{12}_{6}C$, cuya masa atómica es 12.0 u, tenemos que la densidad nuclear (aquí las masas y energías de enlace de los seis electrones se pueden despreciar) es

$$\rho = \frac{m}{\frac{4}{3}\pi R^3} = \frac{12.0\ \text{u} \times 1.66 \times 10^{-27}\ \text{kg/u}}{\frac{4}{3}\pi \times (2.7 \times 10^{-15}\ \text{m})^3} = 2 \times 10^{17}\ \text{kg/m}^3$$

Esta cifra, es esencialmente la misma para todos los núcleos. Algunas estrellas, conocidas como "enanas blancas", se componen de átomos cuyas capas de electrones se han aplastado debido a la enorme presión. Las densidades de estas estrellas se aproximan a la de la materia nuclear pura.

Hemos considerado que los núcleos son esféricos. ¿Cómo se pueden determinar las formas de los núcleos? Si la distribución de la carga en un núcleo no es simétricamente esférica, el núcleo tendrá un momento cuadripolar eléctrico. Un momento cuadripolar nuclear interactuará con los electrones orbitales del átomo, y las desviaciones consecuentes de los niveles de energía atómica conducirán a una división hiperfina de las líneas espectrales. Por supuesto, esta fuente de estructura hiperfina debe distinguirse de la que resulta del momento magnético del núcleo, pero cuando esto ocurre se encuentra que se presentan realmente desviaciones de esfericidad en los núcleos cuyos números cuánticos de spin son 1 o más. Estos núcleos pueden ser esferoides alargados o achatados en los polos, pero la diferencia entre los ejes mayor y menor nunca excede el $\approx$20 % y generalmente es mucho menor. Para casi todos los propósitos es suficiente considerar a los núcleos como esféricos; sin embargo, las desviaciones de la esfericidad, pequeños como son, proporcionan información válida sobre la estructura nuclear.

11.5 LA ENERGIA DE ENLACE

Un átomo estable invariablemente tiene una masa menor que la suma de las masas de sus partículas constituyentes. El átomo de deuterio $^{2}_{1}H$, por ejemplo, tiene una masa de 2.014102u, mientras que la masa de un átomo de hidrógeno ($^{1}_{1}H$) más la de un neutrón es

$$m_{\text{hidrógeno}} + m_n = 1.007825\ \text{u} + 1.008665\ \text{u} = 2.016490\ \text{u}$$

que es 0.002388 u mayor. Puesto que un núcleo de deuterio —llamado *deuterón*— está compuesto por un protón y un neutrón, y ambos, el $^{1}_{1}H$ y el $^{2}_{1}H$ tienen un único orbital de electrones, es evidente que el *defecto de masa* de 0.002388 u está en relación con el enlace de un protón y un neutrón para formar un deuterón. Una masa de 0.002388 u es igual a

$$0.002388\ \text{u} \times 931\ \text{MeV/u} = 2.23\ \text{MeV}$$

www.elsolucionario.org

Cuando un deuterón se forma a partir de un protón libre y un neutrón, se liberan 2.23 MeV. Inversamente, hay que suministrar 2.23 MeV de una fuente exterior para obtener un protón y un neutrón a partir de un deuterón. Esta deducción está sustentada por experimentos sobre la fotodesintegración del deuterón, que muestran que los fotones de rayos gamma deben tener una energía de por lo menos 2.23 MeV para destruir a un deuterón (Fig. 1-4).

El equivalente de energía del defecto de masa en un núcleo recibe el nombre de *energía de enlace* y es una medida de la estabilidad del núcleo. Las energías de enlace surgen de la acción de las fuerzas que mantienen unidos a los nucleones para formar núcleos, como las energías de ionización de los átomos, que se deben suministrar para quitarles electrones, surgen de la acción de fuerzas electrostáticas. Las energías de enlace oscilan entre 2.23 MeV para el deuterón, que es el núcleo compuesto más pequeño, y 1,640 MeV para el $^{209}_{83}$Bi, el núcleo estable más pesado.

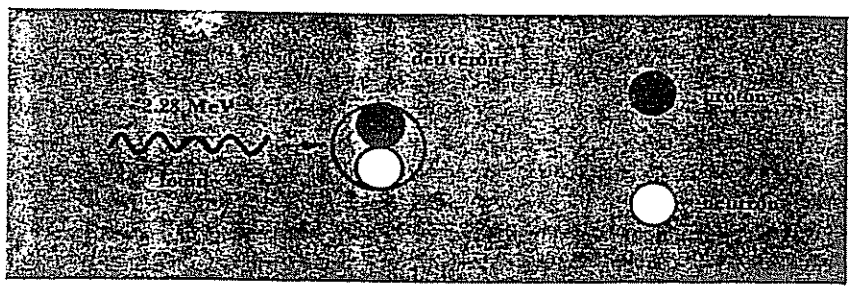


FIGURA 11-4 La energía de enlace del deuterón es 2.23 MeV. Esta se confirma por experimentos que muestran que un fotón de rayos gamma con una energía mínima de 2. 23 MeV puede escindir a un deuterón en un neutrón y un protón libres.

La energía de enlace por nucléon, que se obtiene dividiendo la energía de enlace total de un núcleo entre el número de nucleones que contiene, es una cantidad que presenta mayor importancia. En la Fig. 11-5 se representa la energía de enlace por nucleón en función del número de masa A. La curva sube rápidamente al principio y después en forma gradual hasta alcanzar un máximo de 8.79 MeV cuando $A = 56$, correspondiente al núcleo de hierro $^{56}_{26}$Fe, y más tarde cae lentamente hasta alrededor de 7.6 MeV para los números de masa más elevados. Evidentemente, los núcleos de masa intermedia son más estables ya que hay que suministrar la máxima cantidad de energía para liberar cada uno de sus nucleones. Este hecho sugiere que se debe desarrollar esta energía para que los núcleos pesados se puedan fraccionar en otros más ligeros, o para que los núcleos ligeros se unan formando otros más pesados. El primer proceso se conoce como *fisión nuclear* y el último como *fusión nuclear*. Ambos ocurren bajo circunstancias adecuadas y desarrollan energía como se había previsto.

Las energías de enlace nucleares son notablemente grandes. Para apreciar su magnitud, resulta útil convertir las cifras de MeV/nucleón a unidades más conocidas, como kcal/kg. Como $1\ \text{eV} = 1.60 \times 10^{-19}$ J y $1\ \text{J} = 2.39 \times 10^{-4}$ kcal, encon-

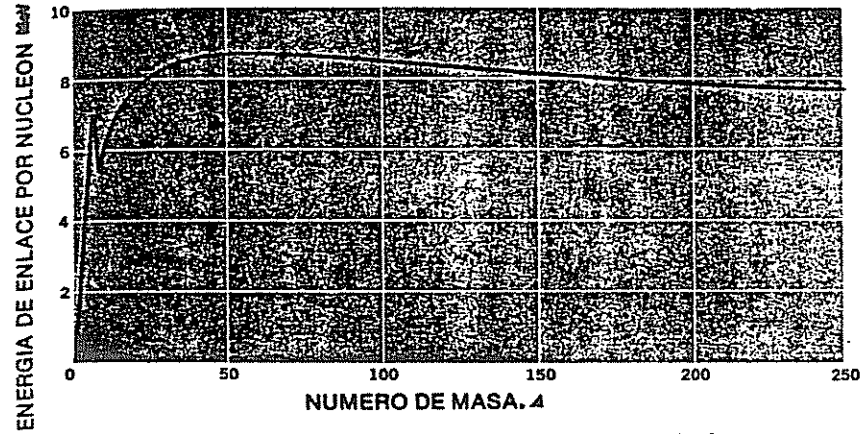


FIGURA 11-5 La energía de enlace por nucleón como función del número de masa. El pico en $A = 4$ corresponde al núcleo de $^4_2$He

tramos que 1 MeV = 3.83×10^{-17} kcal. Una unidad de masa es igual a 1.66×10^{-27} kg, y cada nucleón de un núcleo tiene una masa muy próxima a 1 u. En consecuencia,

$$1\ \frac{\text{MeV}}{\text{nucleón}} = \frac{3.83 \times 10^{-17}\ \text{kcal}}{1.66 \times 10^{-27}\ \text{kg}} = 2.31 \times 10^{10}\ \frac{\text{kcal}}{\text{kg}}$$

Una energía de enlace 8 MeV/nucleón, un valor típico, es, por tanto, equivalente a 1.85×10^{11} kcal/kg. En contraste, el calor de evaporación del agua es sólo de 540 kcal/kg, y aun el calor de combustión de la gasolina, 1.13×10^4 kcal/kg, es 10 millones de veces menor.

*11.6 EL DEUTERON

Las únicas fuerzas de corto alcance que enlazan a los nucleones con tanta seguridad dentro de los núcleos, constituyen, con mucho, las fuerzas más poderosas conocidas. Desafortunadamente, las fuerzas nucleares no se comprenden como las fuerzas eléctricas y, en consecuencia, la teoría de la estructura nuclear es aún primitiva, comparada con la teoría de la estructura atómica. Sin embargo, aun sin comprender satisfactoriamente las fuerzas nucleares, ha habido un progreso considerable en los últimos años en la interpretación de las propiedades y el comportamiento de los núcleos en función de modelos detallados. En este capítulo, veremos algunos de los conceptos implícitos en estos modelos. Antes de examinar cualquiera de estas teorías, es importante ver lo que nos revela una visión muy general. El núcleo más sencillo que contiene más de un nucléon es el *deuterón*, que consta de un protón y un neutrón. La energía de enlace del deuterón es de 2.23 MeV, cantidad que se obtiene de la diferencia de masa entre

entre $m_{\text{deuterón}}$ y $m_p + m_n$ o de los experimentos de fotodesintegración que muestran que sólo los rayos gamma de $h\nu \geqslant 2.23$ MeV pueden romper deuterones desligando sus nucleones constituyentes. En el Cap. 6 analizamos otro sistema de dos cuerpos, el átomo de hidrógeno, con ayuda de la mecánica cuántica, pero en aquel caso se conocía la naturaleza de la fuerza entre el protón y el electrón. Si se conoce una ley que determine la fuerza de una interacción, se puede hallar la función de energía potencial correspondiente V y sustituirla en la ecuación de Schrödinger. Nuestro conocimiento de las fuerzas nucleares es menos completo que el que poseemos de las fuerzas de coulomb, y por eso no podemos tratar el deuterón con tanto detalle cuantitativo como se hizo con el átomo de hidrógeno.

La energía potencial real V del deuterón—que es la energía potencial de cada nucleón con respecto a los demás—depende de la distancia r entre los centros del neutrón y protón, más o menos como muestra la línea continua de la Fig. 11.6 (El "núcleo" repulsivo, quizá de 0.4×10^{-15} m de radio, refleja la incapacidad de los nucleones para unirse más de una determinada cantidad.) Aproximaremos esta $V(r)$ mediante el "pozo cuadrado", como se ve en la línea de trazos de la figura. Esta aproximación significa que consideramos que la fuerza nuclear entre neutrón y protón es cero cuando están separados más de r_0 y tiene una magnitud constante, derivándose de ello una energía potencial $-V_0$, constante, cuando su separación es inferior a r_0. Así, los parámetros V_0 y r_0 son representativos de la fuerza y alcance respectivamente de la interacción que mantiene el deuterón unido, y el potencial del pozo cuadrado es, a su vez, representativo del carácter de pequeño alcance de la interacción.

El potencial del pozo cuadrado significa que V es función sólo de r, y por consiguiente, como en el caso de otros potenciales de fuerza central, resulta más sencillo examinar el problema en un sistema de coordenadas polares esféricas (véase la Fig. 6-1). En coordenadas polares esféricas, la ecuación de Schrödinger para una partícula de masa m es, con $\hbar = h/2\pi$,

$$11.3 \qquad \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0$$

Elijamos como partícula en cuestión el neutrón, e imaginemos que se mueve en el campo de fuerzas del protón. (El caso contrario daría, naturalmente, idéntico resultado). Se aprecia en la Fig. 11-6 que E, la energía total del neutrón, es negativa e igual a la energía de enlace del deuterón.

Al analizar el átomo de hidrógeno, en el que una partícula es mucho más pesada que la otra, es aún necesario considerar los efectos del movimiento nuclear, cosa que hicimos en los capítulos 4 y 6, sustituyendo la masa del electrón m_e por su masa m'. De esta forma, el problema de un protón y un electrón que se mueven alrededor de un centro de gravedad común se transforma en el problema de una partícula sencilla de masa m' que se mueve alrededor de un punto fijo. Aquí resulta aún más adecuado un procedimiento de este tipo, ya que las masas

del neutrón y del protón son casi iguales. De acuerdo con la Ec. 4.27, la masa reducida de un sistema neutrón-protón es

$$11.4 \qquad m' = \frac{m_n m_p}{m_n + m_p}$$

y así sustituimos la m de la Ec. 11.3 por la m' de arriba.

Ahora, supongamos que la solución de la Ec. 11.3 se puede escribir como el producto de las funciones radial y angular,

$$11.5 \qquad \psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

Como antes, la función $R(r)$ describe cómo varía la función de onda ψ a lo largo de un radio vector procedente del núcleo, con θ y ϕ constantes; la función $\Theta(\theta)$ describe cómo varía ψ con el ángulo cenital θ a lo largo de un meridiano de una esfera con centro en $r = 0$, con r y ϕ constantes; y la función $\Phi(\phi)$ describe cómo varía ψ con el ángulo acimutal ϕ a lo largo de un paralelo sobre una esfera con centro en $r = 0$, con r y θ constantes.

Aunque el movimiento puede ocurrir en un potencial de pozo cuadrado, nuestro interés radica en el movimiento radial, es decir, en las oscilaciones del neutrón y del protón alrededor de su centro de gravedad. Si no existe movimiento

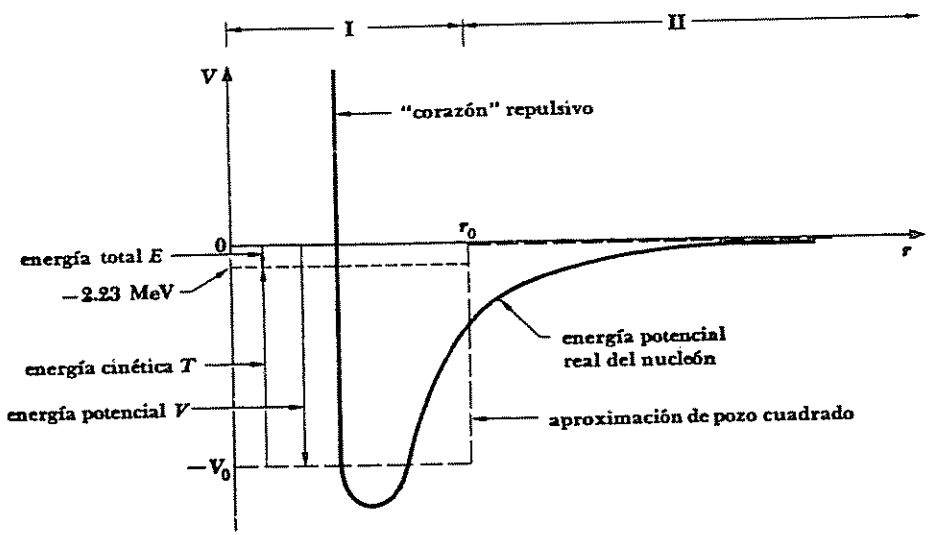


FIGURA 11-6 Energía potencial real de un protón o un neutrón en un deuterón y aproximación de pozo cuadrado para esta energía potencial como función de la distancia entre protón y neutrón.

angular, Θ y Φ son constantes y sus derivadas son 0. Con $\partial\psi/\partial\theta = \partial^2\psi/\partial\phi^2 = 0$, la Ec. 11.3 se transforma en

$$11.6 \qquad \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2m'}{\hbar^2}(E - V)R = 0$$

Se puede simplificar aún más si hacemos que

$$11.7 \qquad u(r) = rR(r)$$

Expresada con la nueva función u, la ecuación de onda se transforma en

$$11.8 \qquad \frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2m'}{\hbar^2}(E - V)u = 0$$

Como V tiene dos valores diferentes, $V = -V_0$ dentro del pozo y $V = 0$ fuera de él, la Ec. 11.8 tendrá dos soluciones diferentes, u_I para $r \leqslant r_0$ y u_{II} para $r \geqslant r_0$. Dentro del pozo, la ecuación de onda es

$$\frac{d^2u_I}{dr^2} + \frac{2m'}{\hbar^2}(E + V_0)u_I = 0$$

o si la expresamos como

$$11.9 \qquad a^2 = \frac{2m'}{\hbar^2}(E + V_0)$$

queda simplemente

$$11.10 \qquad \frac{d^2u_I}{dr^2} + a^2u_I = 0$$

(Se aprecia en la Fig. 11-6 que, como $|V_0| > |E|$, $E + V_0$ y por consiguiente a^2 son cantidades positivas). La Ec. 11.10 es la misma que la ecuación de onda dada en el Cap. 5 para una partícula en una caja, y de nuevo la solución es

$$11.11 \qquad u_I = A\cos ar + B\,\text{sen}\,ar$$

Recordemos que la función de onda radial R viene dada por $R = u/r$, lo que significa que hay que descartar la solución coseno si R no ha de ser infinito para $r = 0$. Portanto, $A = 0$ y u_I dentro del pozo es precisamente

$$11.12 \qquad u_I = B\,\text{sen}\,ar$$

Fuera del pozo $V = 0$, y así

$$11.13 \qquad \frac{d^2u_{II}}{dr^2} + \frac{2m'}{\hbar^2}Eu_{II} = 0$$

Se observa que la energía total E del neutrón es una cantidad negativa puesto que está ligada al protón. Por consiguiente,

$$11.14 \qquad b^2 = \frac{2m'}{\hbar^2}(-E)$$

es una cantidad positiva y podemos escribir

$$11.15 \qquad \frac{d^2u_{II}}{dr^2} - b^2u_{II} = 0$$

La solución de la Ec. 11.15

$$11.16 \qquad u_{II} = Ce^{-br} + De^{br}$$

Como $u \to 0$ cuando $r \to \infty$, se desprende que $D = 0$. De aquí que fuera del pozo

$$11.17 \qquad u_{II} = Ce^{-br}$$

*11.7 ESTADO FUNDAMENTAL DEL DEUTERON

Ahora tenemos expresiones para u (y por consiguiente para ψ) dentro y fuera del pozo, y hay que operar esas expresiones y sus primeras derivadas en el cortorno del pozo, ya que es necesario que u du/dr sean continuas en todo el ámbito donde están definidas. Para $r = r_0$, entonces

$$u_I = u_{II}$$

$$11.18 \qquad B\,\text{sen}\,ar_0 = Ce^{-br_0}$$

y

$$\frac{du_I}{dr} = \frac{du_{II}}{dr}$$

$$11.19 \qquad aB\cos ar_0 = -bCe^{-br_0}$$

Dividiendo la Ec. 11.18 entre la 11.19, eliminamos los coeficientes B y C y se obtiene la ecuación trascendental

$$11.20 \qquad \tan ar_0 = -\frac{a}{b}$$

La Ec. 11.20 no se puede resolver analíticamente, pero se resuelve por método gráfico o numéricamente, con el grado de exactitud deseado. Nótese que

$$11.21 \qquad \frac{a}{b} = \frac{\sqrt{2m'(E + V_0)/\hbar}}{\sqrt{2m'(-E)/\hbar}} = \sqrt{\frac{E + V_0}{-E}}$$

donde $-E$ es la energía de enlace del deuterón y V_0 es la profundidad del pozo de potencial. Puesto que $|V_0| > |E|$, con objeto de obtener una primera aproximación podemos suponer que a/b es tan grande que

$$\tan ar_0 \approx \infty$$

www.elsolucionario.org

Puesto que $\tan\theta$ se hace infinito para $\theta = \pi/2, \pi, 3\pi/2, \ldots, n\pi/2$, en esta aproximación al estado fundamental del deuterón, para el que $n = 1$, corresponde la

$$ar_0 \approx \frac{\pi}{2}$$

(En efecto, este es el único estado ligado del deuterón). Por tanto,

$$\frac{\sqrt{2m'(E + V_0)}}{\hbar} r_0 \approx \frac{\sqrt{2m'V_0}}{\hbar} r_0 \approx \frac{\pi}{2}$$

puesto que suponemos que E es despreciable comparado con V_0, y

11.22 $$V_0 \approx \frac{\pi^2\hbar^2}{8m'r_0^2}$$

La anterior aproximación equivale a suponer que la función u_I dentro del pozo alcanza su valor máximo (correspondiente a $ar = 90°$) en el contorno del pozo. Realmente u_I debe haber sobrepasado allí su máximo con objeto de que u_I se una suavemente con la función u_{II} fuera del pozo, como se muestra en la Fig. 11-7; un cálculo más detallado muestra que $ar \approx 116°$ para $r = r_0$. La diferencia entre ambos resultados se debe a que despreciamos la energía de enlace $-E$ relativa a V_0 al obtener la Ec. 11.22, mientras que si no lo despreciamos se obtiene una aproximación mejor

11.23 $$V_0 \approx \frac{\pi^2\hbar^2}{8m'r_0^2} + \frac{2\hbar}{r_0}\sqrt{\frac{E}{2m'}}$$

La ecuación 11.23 es una relación entre r_0, radio del pozo de potencial y, por consiguiente, representativo del intervalo de fuerzas nucleares, V_0, la profundidad del pozo y, por tanto, representativa de la energía potencial de interacción entre dos nucleones debida a las fuerzas nucleares, y $-E$, energía de enlace del deuterón. Lo que nos preguntamos ahora es si esta relación corresponde a la realidad en el sentido de que una elección razonable de r_0 conduce a un valor razonable de V_0. (No hay nada en nuestro sencillo modelo que pueda indicar un valor único para r_0 o V_0.) Tal elección para r_0 puede ser 2 fm. Sustituyendo los valores conocidos en la Ec. 11.23 y expresando las energías en MeV, queda

$$V_0 \approx \frac{1.0 \times 10^{-28}\ \text{MeV-m}^2}{r_0^2} + \frac{1.9 \times 10^{-14}\ \text{MeV-m}}{r_0}$$

y así, para $r_0 = 2$ fm $= 2 \times 10^{-15}$ m,

$$V_0 \approx 35\ \text{MeV}$$

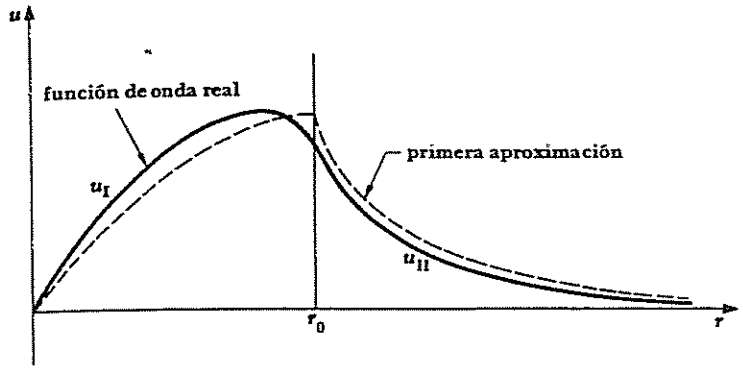


FIGURA 11-7 Función de onda $u(r)$ de un protón o un neutrón en un deuterón.

Este es un valor plausible de V_0, lo que demuestra que las características básicas de nuestro modelo —nucleones que mantienen su identidad en el núcleo en vez de considerarlos íntimamente fusionados, fuerzas nucleares potentes de alcance pequeño y dependencia angular relativamente menor— son válidas.

11.8 LOS ESTADOS TRIPLETE Y SINGULETE

La ecuación 11.23 contiene toda la información sobre la fuerza neutrón-protón que se puede obtener a partir de la observación de que el deuterón es un sistema estable con una energía de enlace de $-E$. Para proseguir, necesitamos datos experimentales adicionales. Entre los datos más significativos está el que concierne al momentum angular, que se ignoró en el anterior análisis del deuterón cuando se consideró al potencial neutrón-protón como una función sólo de r. Esto no es correcto; en general, el momentum angular juega un papel significativo en la estructura nuclear, aunque algunos aspectos de esa estructura son virtualmente independientes de él. En el caso del deuterón, por ejemplo, el protón y el neutrón interactúan de tal manera que el enlace ocurre sólo cuando sus spines son paralelos para producir un *estado triplete*, no cuando sus spines son antiparalelos para producir un *estado singulete*. Evidentemente, la fuerza neutrón-protón depende de la orientación relativa de los spines y es más débil cuando éstos son antiparalelos.

La diferencia entre los potenciales triplete y singulete, aunada al principio de exclusión de Pauli, explica por qué no existen diprotones y dineutrones a pesar de la estabilidad observada del deuterón y la independencia de carga de las fuerzas nucleares. El principio de exclusión evita que ocurra un diprotón o un dineutrón en un estado triplete, ya que con spines paralelos ambos nucleones en cada sistema se encontrarán en estados cuánticos idénticos. Estas restricciones no se aplican al deuterón, ya que el neutrón y el protón que lo forman son partículas diferenciadas

aun con spines paralelos. Sin embargo, mientras que en principio pueden presentarse diprotones o dineutrones en un estado singulete, la fuerza nuclear del singulete no es lo suficientemente fuerte para producir enlace y por eso nunca se han encontrado diprotones ni dineutrones.

11.9 EL MODELO DE LA GOTA LIQUIDA

Mientras que las fuerzas de atracción que los nucleones ejercen unos sobre otros son muy fuertes, su alcance es tan pequeño que cada partícula en un núcleo interactúa solamente con las más próximas. Esta situación es igual a la de los átomos de un sólido que vibran idealmente alrededor de posiciones fijas en la red cristalina, o a la de las moléculas de un líquido que en principio están en libertad de moverse mientras conserven una distancia intermolecular fija. La analogía con un sólido no puede seguir adelante porque un simple cálculo demuestra que las vibraciones de los nucleones alrededor de sus posiciones medias serían demasiado grandes para que el núcleo pudiera ser estable. Por otro lado, la analogía con un líquido es sumamente útil para poder comprender ciertos aspectos del comportamiento nuclear.

Veamos cómo al representar el núcleo como si fuera una gota de líquido se puede explicar la variación observada en la energía de enlace por nucleón, con el número de masa. Comenzaremos suponiendo que la energía asociada con cada enlace nucleón-nucleón tiene un valor U; esta energía es negativa puesto que se trata de fuerzas de atracción, pero normalmente se escribe como positiva, ya que la energía de enlace se considera positiva por conveniencia. Puesto que cada energía de enlace U está compartida por dos nucleones, cada uno tiene una energía de enlace de $\frac{1}{2}U$. Cuando un conjunto de esferas del mismo tamaño se empaquetan juntas en el volumen más pequeño posible, como suponemos que es el caso de los neutrones en el núcleo, cada esfera interna tiene otras doce en contacto con ella (Fig. 11-8). Por tanto, cada nucleón interior en un núcleo tiene una energía de enlace de $12 \times \frac{1}{2}U$, o sea $6U$. Si todos los A nucleones de un núcleo estuvieran en su interior, la energía de enlace total del núcleo sería

11.24 $$E_v = 6AU$$

Esta ecuación se escribe simplemente como

11.25 $$E_v = a_1 A$$

La energía E_v se llama *energía de volumen* del núcleo y es directamente proporcional a A.

En realidad, algunos nucleones están sobre la superficie del núcleo, de modo que cada uno tiene algo menos de 12 a su alrededor. El número de estos nucleones depende del área superficial del núcleo en cuestión. Un núcleo de radio R tiene un área de

$$4\pi R^2 = 4\pi R_0^2 A^{2/3}$$

Por tanto, el número de nucleones con número de enlaces poco superior al máximo es proporcional a $A^{2/3}$, reduciendo la energía total de enlace a

11.26 $$E_s = -a_2 A^{2/3}$$

La energía negativa E_s recibe el nombre de *energía superficial* del núcleo y es más significativa para los núcleos más ligeros, ya que una fracción mayor de sus nucleones está sobre la superficie. Debido a que los sistemas naturales tienden siempre a desarrollar configuraciones de mínima energía potencial, los núcleos tienden a desarrollar configuraciones de máxima energía de enlace. (Recordemos que la energía de enlace es la diferencia masa-energía entre un núcleo y los mismos números de protones y neutrones libres.) Por tanto, un núcleo exhibiría el mismo efecto de tensión superficial que una gota líquida y, en ausencia de fuerzas externas, su forma sería esférica, puesto que la esfera tiene el área superficial menor para un volumen dado.

La repulsión electrostática entre cada par de protones en un núcleo contribuye también a disminuir su energía de enlace. La *energía de coulomb* E_c de un núcleo equivale al trabajo que se debe hacer para llevar los Z protones desde el infinito hasta un volumen igual al del núcleo. Por tanto, E_c es proporcional al número de pares de protones en un núcleo que tiene A protones $Z(Z-1)/2$, e inversamente proporcional al radio del núcleo $R = R_0 A^{1/3}$.

11.27 $$E_c = -a_3 \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}}$$

La energía de coulomb es negativa porque se debe a fuerzas que se oponen a la estabilidad del núcleo.

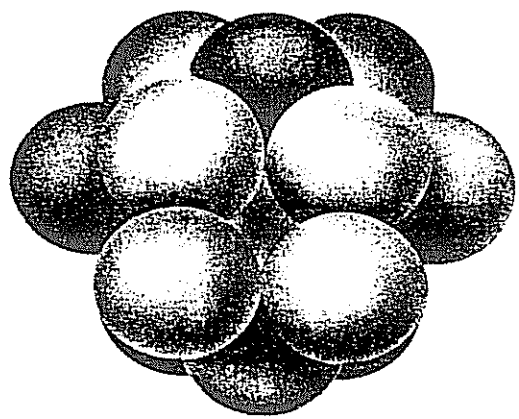


FIGURA 11-8 En un conjunto compacto de esferas idénticas, cada esfera interior está en contacto con otras doce.

La *energía de enlace* total E_b de un núcleo es la suma de las energías de volumen, superficial y de coulomb:

$$E_b = E_v + E_s + E_c$$

11.28
$$= a_1A - a_2A^{2/3} - a_3\frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}}$$

La energía de enlace por *nucleón* es, de este modo,

11.29
$$\frac{E_b}{A} = a_1 - \frac{a_2}{A^{1/3}} - a_3\frac{Z(Z-1)}{A^{4/3}}$$

Cada uno de los términos de esta ecuación, junto a su suma E_b/A, se representan en la Fig. 11-9 en función de A. La suma es casi exactamente la misma que la curva empírica de E_b/A. que se muestra en la Fig. 11-5. Así, la analogía de un núcleo con una gota líquida tiene al menos cierta validez, y nos anima a ver que otros aspectos del comportamiento del núcleo pueden ser aclarados por ella. En el Cap. 12 se hará esto al estudiar las reacciones nucleares.

Antes de dejar el estudio de la energía de enlace nuclear, habría que considerar otros efectos distintos de los hasta ahora considerados, y que también están implicados. Por ejemplo, los núcleos con igual número de protones y neutrones son especialmente estables, como lo son también los que tienen un número par de ellos. Núcleos como $^4_2$He, $^{12}_6$C y $^{16}_8$O dan lugar a picos en la curva empírica de energía de enlace por nucleón. Estos picos indican que los estados de energía de los protones y neutrones en el núcleo son casi idénticos y que cada estado puede ser ocupado por dos partículas de spines opuestos, como se vio en la Sec. 11.3.

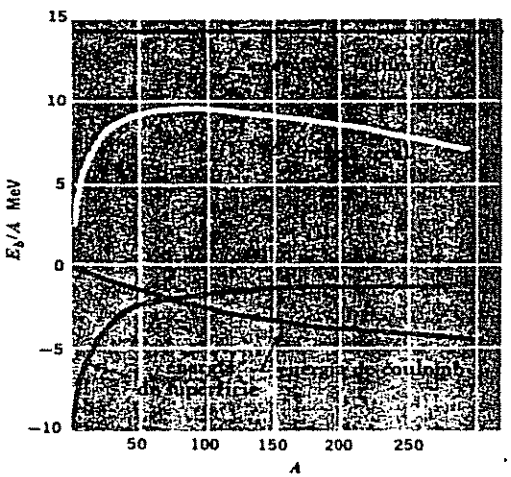


FIGURA 11-9 La energía de amarre por nucleón es la suma de las energías de volumen, superficial y de coulomb.

11.10 EL MODELO DE CAPAS

La suposición básica del modelo de la gota líquida es que los constituyentes de un núcleo interactúan solamente con sus vecinos más próximos, como las moléculas de un líquido. En esta suposición hay una buena parte de afirmación empírica. La hipótesis contraria de que los nucleones interactúan primariamente con un campo de fuerza generalizado en lugar de hacerlo directamente unos con otros, está sustentada por amplias pruebas experimentales. Esta situación recuerda a la de los electrones en un átomo, donde solamente ciertos estados cuánticos son permitidos y no más de dos electrones, que son partículas de Fermi, pueden ocupar cada estado. Los nucleones son también partículas de Fermi, de modo que varias propiedades nucleares varían periódicamente con Z y N, de manera que recuerda la variación periódica de las propiedades atómicas con Z.

Se puede pensar que los electrones en un átomo ocupan posiciones en las "capas" establecidas por los diversos números cuánticos principales, y que el grado de ocupación de la capa externa es lo que determina ciertos aspectos importantes del comportamiento de un átomo. Por ejemplo, los átomos con 2,10,18,36,54 y 86 electrones tienen todas sus capas electrónicas completamente llenas. Estas estructuras electrónicas son estables y explican, por tanto, por qué los gases son inertes químicamente. Esta misma situación se observa en los núcleos; los que tienen 2,8,20,28,50,82 y 126 neutrones o protones son más abundantes que aquellos que tienen número de masa similar, dando a entender que sus estructuras electrónicas son más estables. Puesto que los núcleos complejos se producen en las reacciones entre otros más ligeros, la formación de núcleos cada vez más pesados se ve retardada por cada núcleo inerte que se forma; de aquí la abundancia de ellos.

Otra prueba señala también el significado de los números 2,8,20,28,50,82 y 126, llamados *números mágicos,* en la estructura nuclear. Un ejemplo lo constituye el modelo observado de momentos cuadripolares eléctricos del núcleo, que se miden partiendo de las distribuciones de cargas nucleares procedentes de la esfericidad. Un núcleo esférico no tiene momento cuadripolar, mientras que una forma apepinada tiene un momento positivo, y una forma de calabaza tiene un momento negativo. Los núcleos con número mágico N y Z tienen momentos cuadripolares iguales a 0 y por eso son esféricos, mientras que otros núcleos se apartan de esta forma.

El *modelo de capas* del núcleo es un intento para explicar la existencia de los números mágicos y de algunas otras propiedades nucleares en función de la interacción entre un nucleón individual y un campo de fuerzas producido por todos los demás nucleones. Se emplea una función de energía potencial que corresponda a un pozo cuadrado de profundidad aproximada de 50 MeV con ángulos redondeados, de manera que hay un cambio gradual más de acuerdo con la realidad desde $V = V_0$ a $V = 0$ que el cambio repentino del potencial del pozo cuadrado que empleamos al considerar el deuterón. Se resuelve, entonces, la ecuación de Schrödinger para una partícula en un pozo de potencial de esta clase, y se encuentra que los estados estacionarios del sistema se hallan caracterizados

www.elsolucionario.org

por los números cuánticos, n, l, y m_l, cuyo significado es el mismo que tenían en el caso análogo de estados estacionarios de electrones atómicos. Los neutrones y protones ocupan series de estados separados en un núcleo, ya que el último interactúa eléctricamente como si se tratara de una carga nuclear específica.

Con objeto de mantener una serie de niveles de energía que conduzcan a los números mágicos observados, es meramente necesario suponer una interacción spin-órbita cuya magnitud sea tal que el consiguiente desdoblamiento de niveles de energía en subniveles sea grande al serlo l, esto es, para grandes momenta angulares orbitales. Se supone que el acoplamiento LS se encuentra solamente en los núcleos más ligeros, en los que los valores de l son necesariamente pequeños en sus configuraciones normales. En este esquema, tal como se vio en el Cap. 7, los momenta angulares intrínsecos de spin $\mathbf{S}_i$ de las partículas que nos ocupan (los neutrones forman un grupo y los protones otro) están acoplados en un momentum de spin total $\mathbf{S}$ y los momenta angulares orbitales $\mathbf{L}_i$ están separadamente acoplados en un momentum orbital total $\mathbf{J}$ de magnitud $\sqrt{J(J+1)}\,\hbar$. Después de una región de transición en la que se tiene un esquema de acoplamiento intermedio, los núcleos más pesados muestran un acoplamiento jj. En este caso el $\mathbf{S}_i$ y el $\mathbf{L}_i$ de cada partícula están en primer lugar, acoplados a un $\mathbf{J}_i$ para esta partícula, de magnitud $\sqrt{j(j+1)}\,\hbar$, y los diversos $\mathbf{J}_i$ se acoplan entonces en un momentum angular $\mathbf{J}$. La mayor parte de los núcleos tienen el esquema de acoplamiento jj.

Cuando se supone una energía apropiada para la interacción spin-órbita, los niveles de energía de cualquier clase de nucleones caen dentro de la secuencia que aparece en la Fig. 11-10. Los niveles se designan con un prefijo igual al número cuántico total n, una letra que indica l para cada partícula en ese nivel de acuerdo con el modelo normal ($s,p,d,f,g,\ldots$, corresponden respectivamente a $l = 0,1,2,3,4,\ldots$), y un subíndice igual a j. La interacción spin-órbita divide cada estado de j dado en $2j+1$ subestados, puesto que hay $2j+1$ orientaciones permitidas de $\mathbf{J}_i$. Aparecen grandes claros de energía en el espacio de los niveles a intervalos compatibles con la noción de capas separadas. El número de estados nucleónicos disponibles en cada capa nuclear es, en orden creciente de energía, 2,6,8,12, 22,32 y 44; por tanto, las capas están llenas cuando hay 2,8,20,50,82 y 126 neutrones o protones en un núcleo.

El modelo de capas explica varios fenómenos nucleares en función de los números mágicos. Puesto que cada subnivel de energía puede contener dos partículas (spín hacia arriba y spín hacia abajo), solamente los subniveles llenos están presentes cuando hay un número par de neutrones y protones en el núcleo (núcleo "par-par"). Por otro lado, un núcleo con número impar de protones y neutrones (núcleo "impar-impar") tiene subniveles sin llenar para ambas clases de partículas. El que la estabilidad venga dada por los subniveles llenos se confirma por el hecho de que son conocidos 160 núclidos estables par-par, en contra de, solamente, cuatro impar-impar, aun cuando estos últimos están en el extremo inferior de la tabla periódica: $^{2}_{1}\mathrm{H}$, $^{6}_{3}\mathrm{Li}$, $^{10}_{5}\mathrm{B}$ y $^{14}_{7}\mathrm{N}$.

Más pruebas en favor del modelo de capas es su capacidad para predecir el momentum angular total del núcleo. En los núcleos par-par, los protones y neutrones son pares, de modo que se anulan entre sí los momenta angulares de

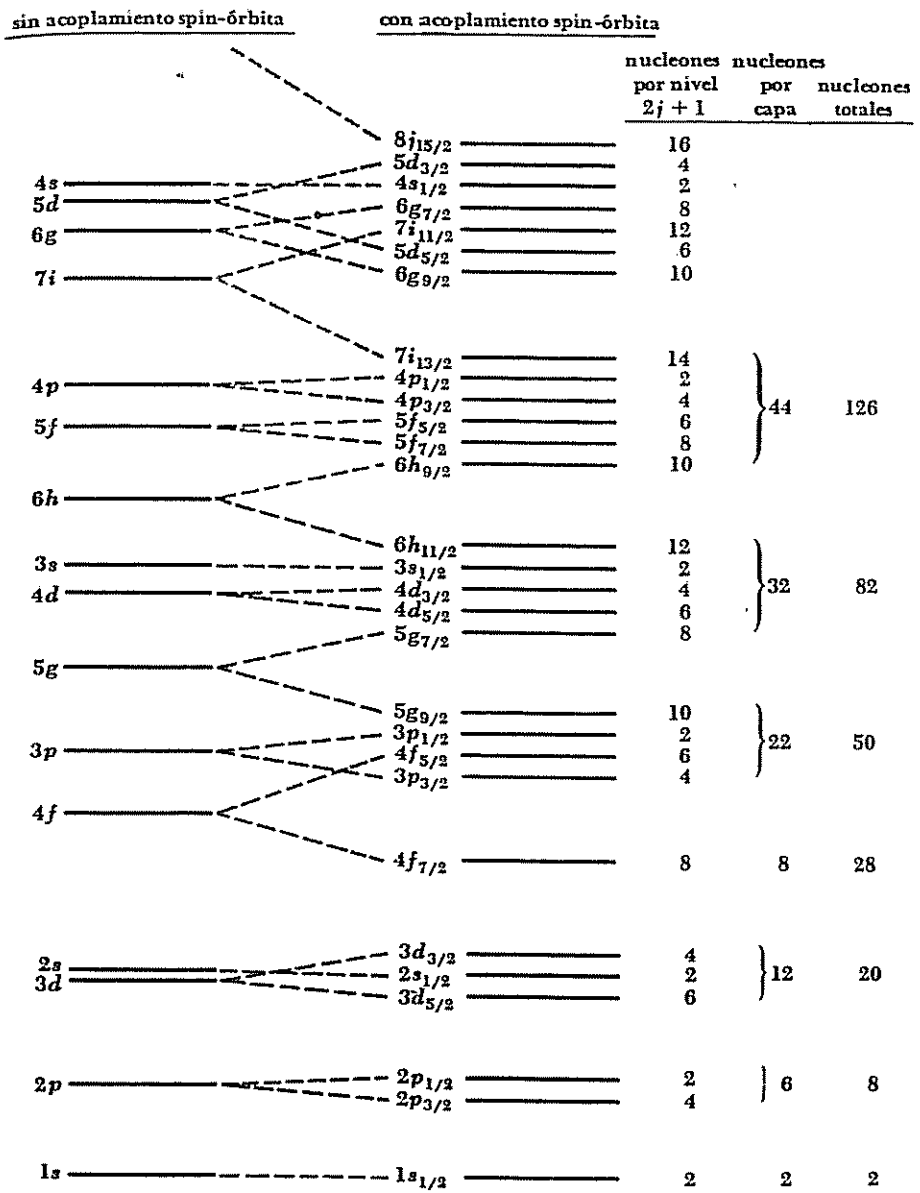


FIGURA 11-10 Secuencia de niveles de energía del nucleón de acuerdo con el modelo de capas (no está a escala).

spin y órbita. Por tanto, un núcleo par-par tiene, de acuerdo con lo que se ha observado, momenta angulares nucleares nulos. En los núcleos par-impar (Z par y N impar) e impar-par (Z impar y N par), el spin semientero del neutrón "extra" se combina con el momentum angular entero del resto del núcleo para dar un momentum angular total semientero; en los núcleos impar-impar hay un protón extra y un neutrón extra cuyos spines semienteros dan lugar a un momentum angular total entero. Todo esto se ha confirmado experimentalmente.

Si los nucleones de un núcleo están tan cerca unos de otros e interactúan con tanta fuerza que el núcleo se puede comparar con una gota de líquido, ¿cómo se pueden considerar estos mismos nucleones moviéndose independientemente unos de otros en un campo de fuerza común, como exige el modelo de capas? Parecería que los puntos de vista se excluyen mutuamente, ya que un nucleón que se mueve a través de un núcleo del tipo gota líquida puede, con seguridad, tener choques frecuentes con otros nucleones.

Un examen más detallado muestra que no hay tal contradicción. En el estado básico de un núcleo, los neutrones y los protones llenan los niveles de energía disponibles con el fin de aumentar la energía, de manera que se cumpla el principio de exclusión (ver Fig. 11-2). En un choque, la energía se transfiere de un nucleón a otro, quedando el primero en un estado de energía reducida y el segundo en uno de energía incrementada. Pero todos los niveles disponibles de baja energía ya están llenos, de manera que sólo puede haber una transferencia de energía de este tipo si se viola el principio de exclusión. Por supuesto, es posible que dos nucleones del mismo tipo sencillamente intercambien sus energías respectivas, pero un choque de este tipo es muy significativo, ya que el sistema permanece exactamente en el mismo estado en que estaba inicialmente. Así, en esencia, el principio de exclusión evita los choques nucleón-nucleón aun en un núcleo muy apretado, y, por lo tanto, justifica que la partícula independiente se aproxime a la estructura nuclear.

Tanto el modelo de la gota líquida como el de capas, aunque por distintos caminos, explican gran parte de lo que se conoce del comportamiento del núcleo. Recientemente se han hecho intentos para construir una teoría que combine los mejores aspectos de estos modelos, habiéndose conseguido éxitos parciales en este empeño. El modelo resultante incluye la posibilidad de un núcleo que gire como un conjunto. La situación se complica por la forma no esférica que tienen todos los núcleos, menos los par-par, y la distorsión centrífuga que experimenta un núcleo al girar; la teoría detallada está de acuerdo con el espaciado de niveles nucleares excitados, deducido de los espectros de rayos gamma de los núcleos y por otros procedimientos.

Problemas

1. Un haz de iones de $^{6}_{3}$Li con una sola carga y con energías de 400 eV entra en un campo magnético uniforme de una densidad de flujo de 0.08 T. Los iones se mueven perpendicularmente a la dirección del campo. Determinar el radio de la trayectoria en el campo magnético. (La masa atómica del $^{6}_{3}$Li es 6.01513 u.)

2. Un haz de iones boro con una sola carga y energía de 1.000 eV entra en un campo magnético uniforme de densidad de flujo de 0.2 T. Los iones se mueven perpendicularmente a la dirección del campo. Determinar los radios de las trayectorias de los isótopos $^{10}_{5}$B (10.013 u) y $^{11}_{5}$B (11.009 u) en el campo magnético.

3. El boro ordinario es una mezcla de los isótopos $^{10}_{5}$B y $^{11}_{5}$B con un peso atómico compuesto de 10.82 u. ¿ Qué porcentaje de cada isótopo está presente en el boro ordinario ?

4. Demostrar que la densidad nuclear de $^{1}_{1}$H es 10^{14} veces mayor que su densidad atómica. (Suponer que el átomo tiene el radio de la primera órbita de Bohr.)

5. La energía de enlace del $^{35}_{17}$Cl es 298 MeV. Determinar su masa en u.

6. La masa del $^{20}_{10}$Ne es 19.9924 u. Hallar su energía de enlace en MeV.

7. Determinar la energía media de enlace por nucleón en el $^{16}_{8}$O. (La masa del átomo $^{16}_{8}$O neutro es 15.9949 u.)

8. ¿Cuánta energía se requiere para eliminar un protón del $^{16}_{8}$O? (La masa del átomo $^{15}_{7}$N neutro es 15.0001 u; la del átomo $^{15}_{8}$O neutro es 15.0030 u.)

9. ¿Cuánta energía se requiere para quitar un neutrón del $^{16}_{8}$O?

10. Comparar la energía mínima que debe tener un fotón de rayos gamma para desintegrar una partícula alfa en un tritón y un protón con la que debe tener para desintegrarla en un núcleo $^{3}_{2}$He y un neutrón. (Las masas atómicas del $^{3}_{1}$H y del $^{3}_{2}$He son respectivamente 3.01605 u y 3.01603 u.)

11. Demostrar que la energía potencial electrostática de dos protones separados una distancia de 1.7×10^{-15} m es del orden de magnitud apropiada para explicar la diferencia de energía de enlace entre $^{3}_{1}$H y $^{3}_{2}$He. ¿Por qué este resultado apoya el problema de la independencia de la carga de las fuerzas nucleares? (Las masas de los átomos neutros son respectivamente 3.016049 y 3.016029 u.)

12. Protones, neutrones y electrones tienen todos spines de $\frac{1}{2}$. ¿Por qué los átomos de $^{4}_{2}$He obedecen a la estadística de Bose-Einstein, mientras que los $^{3}_{2}$He obedecen a la de Fermi-Dirac?

13. Demostrar que los resultados de la Sec. 11.7 —un pozo potencial para el deuterón que tiene aproximadamente 35 MeV de profundidad y 2 fm de radio— son congruentes con el principio de incertidumbre.

14. Calcular el valor aproximado de a_3 en la Ec. 11.27 empleando las suposiciones que resulten apropiadas.

15. De acuerdo con el *modelo del gas de Fermi* del núcleo, los protones y los neutrones se encuentran en una caja de dimensiones nucleares y llenan los estados cuánticos disponibles más bajos con la amplitud que permite el principio de exclusión. Como tanto los protones como los neutrones tienen spines de $\frac{1}{2}$, son partículas Fermi y deben obedecer a la estadística de Fermi-Dirac. *a*) Partiendo de la Ec. 10.12, deducir una ecuación para la energía Fermi en un núcleo, considerando que hay el mismo número de neutrones que de protones. *b*) Hallar la energía de Fermi para un núcleo en el que $R_0 = 1.2$ fm.

TRANSFORMACIONES NUCLEARES 12

A pesar de la magnitud de las fuerzas que mantienen unidos a sus nucleones, los núcleos atómicos no son inmutables. Muchos núcleos son inestables y alteran su composición espontáneamente por medio de la desintegración radiactiva. Todos los núcleos pueden ser transformados por reacciones con nucleones y otros núcleos que chocan con ellos. De hecho, los núcleos complejos se llegan a formar en primer lugar a través de reacciones nucleares sucesivas, probablemente en el interior de formaciones estelares. En este capítulo se estudian los principales aspectos de la radiactividad y de las reacciones nucleares.

12.1 DESINTEGRACION RADIACTIVA

Tal vez nunca un fenómeno haya tenido tanta importancia en el desarrollo de la física, tanto atómica como nuclear, como la radiactividad. Un núcleo que emprende una desintegración radiactiva emite espontáneamente un núcleo de $^4_2$He (partícula alfa), un electrón (partícula beta) o un fotón (rayo gamma) con lo que se libera de la energía de excitación nuclear o logra una configuración, que es, o conducirá a otra, de mayor estabilidad.

La *actividad* de una muestra de material radiactivo es la proporción en que los núcleos de sus átomos constituyentes se desintegran. Si N es un número de núcleos presentes en un determinado instante en la muestra, su actividad R viene dada por

$$R = -\frac{dN}{dt} \tag{12-1}$$

El signo menos tiene por objeto hacer que R sea una cantidad positiva, ya que dN/dt es, por supuesto, intrínsecamente negativo. Puesto que las unidades de actividad natural son desintegraciones por segundo, se acostumbra expresar R en

www.elsolucionario.org

función del *curie* (Ci) y sus submúltiplos: el *milicurie* (mCi) y el *microcurie* (μCi). Por definición,

$$1 \text{ Ci} = 3.70 \times 10^{10} \text{ desintegraciones/s}$$
$$1 \text{ mc} = 10^{-3} \text{ Ci} = 3.70 \times 10^{7} \text{ desintegraciones/s}$$
$$1 \ \mu\text{c} = 10^{-6} \text{ Ci} = 3.70 \times 10^{4} \text{ desintegraciones/s}$$

Las medidas experimentales de las actividades de muestras radiactivas indican que, en todos los casos, disminuyen exponencialmente con el tiempo. La Fig. 12-1 es una representación de R en función de t para un radioisótopo típico. Notamos que en cada periodo de 5 horas, sin que se tenga en cuenta el comienzo del periodo, la actividad se reduce a la mitad de la que tenía al principio del mismo. De acuerdo con esto, la vida media $T_{1/2}$ del isótopo es de 5 horas. Cada radioisótopo tiene una vida media característica; algunos tienen vidas medias de millonésimas de segundo, y otros de más de mil millones de años. Al comenzar las observaciones, que se representan en la Fig. 12-1, la actividad de la muestra era R_0. Cinco horas después, disminuyó a $0.5R_0$. Otras cinco horas más tarde, R ha disminuido de acuerdo con un factor de 2 hasta $0.25R_0$. Esto es, después de un intervalo de tiempo de $2T_{1/2}$, la actividad de la muestra es solamente 0.25 del valor inicial. Al cabo de otras cinco horas, correspondientes a un intervalo total de $3T$, la actividad es $\frac{1}{2}(0\ 25R_0)$ o bien $0.125R_0$.

La Fig. 12-1 indica que podemos expresar nuestra información empírica sobre la variación de la actividad con el tiempo en la forma

$$R = R_0 e^{-\lambda t} \tag{12.2}$$

donde λ, llamado *constante de desintegración*, tiene un valor diferente para cada radioisótopo. La relación entre la constante de desintegración λ y la semivida $T_{1/2}$ se establece fácilmente. Después de haber transcurrido una vida media, esto es, cuando $t = T_{1/2}$, la actividad R cae, por definición, hasta $\frac{1}{2}R_0$. Por tanto,

$$R = R_0 e^{-\lambda t}$$
$$\tfrac{1}{2}R_0 = R_0 e^{-\lambda T_{1/2}}$$
$$e^{\lambda T_{1/2}} = 2$$

Tomando logaritmos en ambos miembros de esta ecuación,

$$\lambda T_{1/2} = \ln 2$$

Vida media

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0.693}{\lambda} \tag{12.3}$$

La constante de desintegración del radioisótopo cuya vida media es de 5 horas es, por tanto,

$$\lambda = \frac{0.693}{T_{1/2}}$$
$$= \frac{0.693}{5 \text{ h} \times 3{,}600 \text{ s/h}}$$
$$= 3.85 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$$

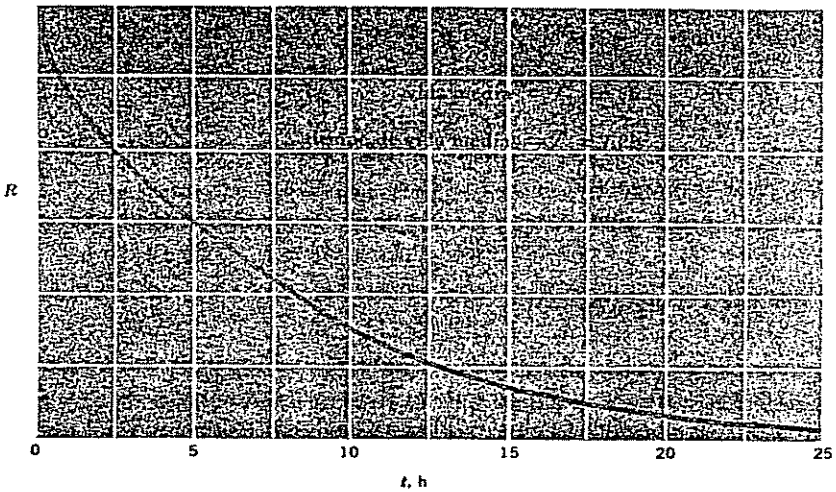


Figura 12-1 La actividad de un radioisótopo disminuye exponencialmente con el tiempo.

El hecho de que la desintegración radiactiva siga la ley exponencial de la Ec. 12.2 es una clara muestra de que este fenómeno es de naturaleza estadística; cada núcleo en un material radiactivo tiene una cierta probabilidad de desintegrarse, pero no hay manera de conocer por adelantado *qué* núcleos se desintegrarán realmente en un lapso determinado. Si la muestra es lo suficientemente grande (esto es, si hay presentes muchos núcleos), la fracción real de los que se desintegran en un intervalo de tiempo será muy próxima a la probabilidad de la desintegración de cualquier núcleo individual. La afirmación de que un radioisótopo tiene una vida media de cinco horas quiere decir que cada núcleo tiene una probabilidad de 50% de desintegrarse en ese periodo. Esto *no* significa que la probabilidad sea del 100 % para que se desintegre en diez horas; un núcleo no tiene memoria, y su probabilidad de desintegración por unidad de tiempo es constante hasta que realmente se desintegre. Una vida media de cinco horas supone un 75% de probabilidad de desintegración en diez horas; 87.5% en quince horas, 93.75% en veinte horas, y así sucesivamente, puesto que cada cinco horas la probabilidad es del 50%.

La ley empírica de actividad de la Ec. 12.2 se desprende directamente de la suposición de una constante de probabilidad λ por unidad de tiempo para la desintegración de cada núcleo de un isótopo dado. Puesto que λ es la probabilidad por unidad de tiempo, $\lambda\, dt$ es la probabilidad que tiene cualquier núcleo para desintegrarse en el intervalo dt. Si una muestra contiene N núcleos sin desintegrarse, el número dN de los que lo hacen en un tiempo dt es el producto del número de núcleos N por la probabilidad $\lambda\, dt$ con que cada núcleo se desintegra en el intervalo dt. Esto es,

$$dN = -N\lambda\, dt \tag{12.4}$$

donde se requiere el signo menos, debido a que N disminuye al aumentar t. La Ec. 12.4 se puede escribir como

$$\frac{dN}{N} = -\lambda\, dt$$

integrando en ambos lados

$$\int_{N_0}^{N} \frac{dN}{N} = -\lambda \int_0^t dt$$

$$\ln N - \ln N_0 = -\lambda t \qquad \text{12.5}$$

$$N = N_0 e^{-\lambda t}$$

Esta ecuación nos da el número N de núcleos no desintegrados en el tiempo t en función de la probabilidad de desintegración por unidad de tiempo λ del isótopo de que se trate, y del número N_0 de núcleos sin desintegrar para $t = 0$.

Puesto que la actividad de una muestra radiactiva se define como

$$R = -\frac{dN}{dt}$$

de la Ec. 12.5 tenemos que

$$R = \lambda N_0 e^{-\lambda t}$$

Esto concuerda con la ley empírica de actividad si

$$R_0 = \lambda N_0$$

o en general si

$$R = \lambda N \qquad \text{12.6}$$

Evidentemente, la constante de desintegración λ de un radioisótopo es igual que la probabilidad de desintegración por unidad de tiempo de un núcleo de dicho isótopo.

La Ec. 12.6 nos permite calcular la actividad de una muestra de radioisótopo si conocemos su masa, el peso atómico y la constante de desintegración. Como ejemplo, determinemos la actividad de 1 g de $^{90}_{38}$Sr, cuya semivida para la desintegración beta es de veintiocho años. La constante de desintegración del $^{90}_{38}$Sr es

$$\lambda = \frac{0.693}{T_{1/2}}$$

$$= \frac{0.693}{28 \text{ años} \times 3.16 \times 10^7 \text{ s/años}}$$

$$= 7.83 \times 10^{-10}\ \text{s}^{-1}$$

Un kmol de un isótopo tiene una masa igual al peso atómico del isótopo expresado en kilogramos. Por tanto, 1 g de $^{90}_{38}$Sr contiene

$$\frac{10^{-3} \text{ kg}}{90 \text{ kg/kmol}} = 1.11 \times 10^{-5} \text{ kmol}$$

Un kmol de un isótopo contiene un número de átomos igual al de Avogadro, de modo que 1 gramo de $^{90}_{38}$Sr tendrá:

$$1.11 \times 10^{-5} \text{ kmol} \times 6.025 \times 10^{26} \text{ átomos/kmol}$$

$$= 6.69 \times 10^{21} \text{ átomos}$$

Por lo tanto, la actividad de la muestra es

$$R = \lambda N$$

$$= 7.83 \times 10^{-10} \times 6.69 \times 10^{21}\ \text{s}^{-1}$$

$$= 5.23 \times 10^{12}\ \text{s}^{-1}$$

$$= 141 \text{ Ci}$$

Es importante tener presente que no es lo mismo vida media que *tiempo de vida media* $\overline{T}$. El tiempo de vida media es el recíproco de la probabilidad de desintegración por unidad de tiempo:

$$\overline{T} = \frac{1}{\lambda} \qquad \text{12.7}$$

Por tanto,

$$\overline{T} = \frac{1}{\lambda} = \frac{T_{1/2}}{0.693} = 1.44 T_{1/2} \qquad \text{12.8}$$

Tiempo de vida media

$\overline{T}$ es casi 0.5 veces mayor que $T_{1/2}$. El tiempo de vida media de un isótopo cuya vida media es cinco horas es 7.2 horas.

12.2 SERIES RADIACTIVAS

La mayor parte de los elementos radiactivos encontrados en la naturaleza son miembros de cuatro *series radiactivas*. Cada serie está formada por una sucesión de productos que proceden, en último término, de un solo núclido. La razón por la que haya solamente cuatro series se debe al hecho de que la desintegración alfa reduce el número de masa de un núcleo en 4. De este modo, los núclidos cuyos números de masa están dados por

$$A = 4n \qquad \text{12.9}$$

donde n es un número entero, se pueden desintegrar unos en otros disminuyendo el orden del número de masa. Los núclidos radiactivos cuyos números de masa

obedecen a la Ec. 12.9 se dice que son miembros de la serie $4n$. Los miembros de la serie $4n + 1$ tienen números de masa dados por

12.10 $$A = 4n + 1$$

Tabla 12.1
CUATRO SERIES RADIACTIVAS

Número de masa	Serie	Padre	Vida media en años	Producto final estable
$4n$	Torio	$^{232}_{90}Th$	1.39×10^{10}	$^{208}_{82}Pb$
$4n + 1$	Neptunio	$^{237}_{93}Np$	2.25×10^{6}	$^{209}_{83}Bi$
$4n + 2$	Uranio	$^{238}_{92}U$	4.51×10^{9}	$^{206}_{82}Pb$
$4n + 3$	Actinio	$^{235}_{92}U$	7.07×10^{8}	$^{207}_{82}Pb$

y los de las series $4n + 2$ y $4n + 3$ están especificados respectivamente por

12.11 $$A = 4n + 2$$

12.12 $$A = 4n + 3$$

Los miembros de cada una de estas series pueden también desintegrarse unos a otros en orden descendiente del número de masa.

La Tabla 12.1 es una lista de los nombres de cuatro importantes series radiactivas, de sus núclidos de origen y su vida media, y de los miembros estables que son los productos finales de las series. La vida media del neptunio es tan corta, comparada con la edad calculada del universo ($\sim 10^{10}$ años), que los miembros de esta serie no se encuentran actualmente en la naturaleza. No obstante, se ha producido en el laboratorio mediante bombardeo con neutrones de otros núcleos más pesados; una breve descripción de este fenómeno se presenta en la Sec. 12.12. En las Figs. 12-2 a 12-5 se muestran las secuencias de las desintegraciones alfa y beta, que conducen desde la cabeza hasta el producto estable final de cada serie. Algunos núclidos se pueden descomponer por emisión alfa o beta, de modo que la cadena de desintegración *se ramifica* en ellos. Así, $^{212}_{83}Bi$, un miembro de la serie del

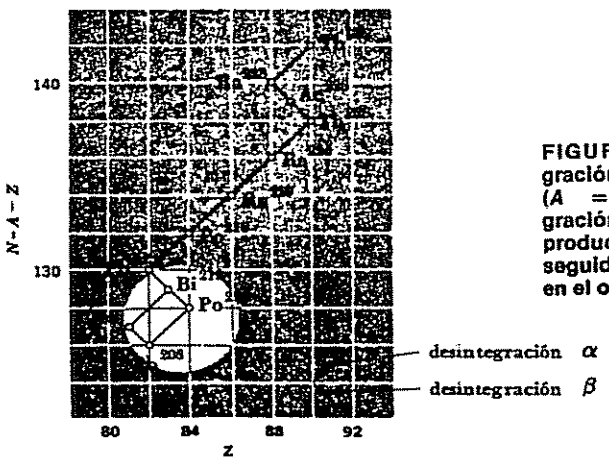


FIGURA 12-2 Desintegración de la serie del torio ($A = 4n$). La desintegración del $^{212}_{83}Bi$ puede producirse por emisión alfa, seguida de emisión beta o en el orden inverso.

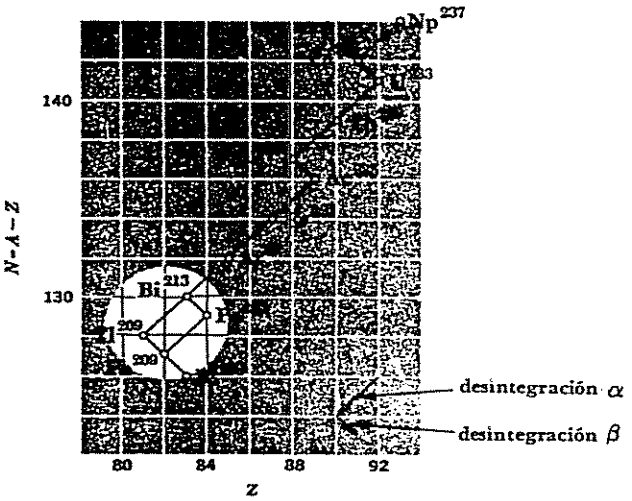


FIGURA 12-3 Desintegración de la serie del neptunio ($A = 4n + 1$). La desintegración del $^{213}_{83}Bi$ puede producirse por emisión alfa, seguida de emisión beta o en el orden inverso.

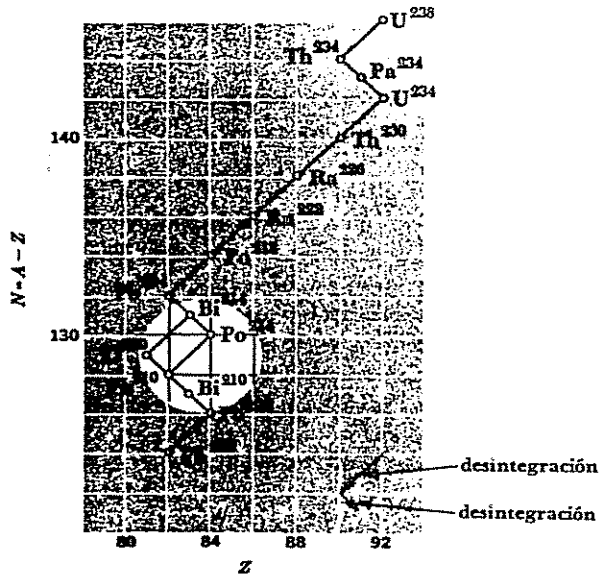


FIGURA 12-4 Serie de desintegración del uranio ($A = 4n + 2$). La desintegración del $^{214}_{83}Bi$ puede producirse por emisión alfa, seguida de emisión beta o en el orden inverso.

www.elsolucionario.org

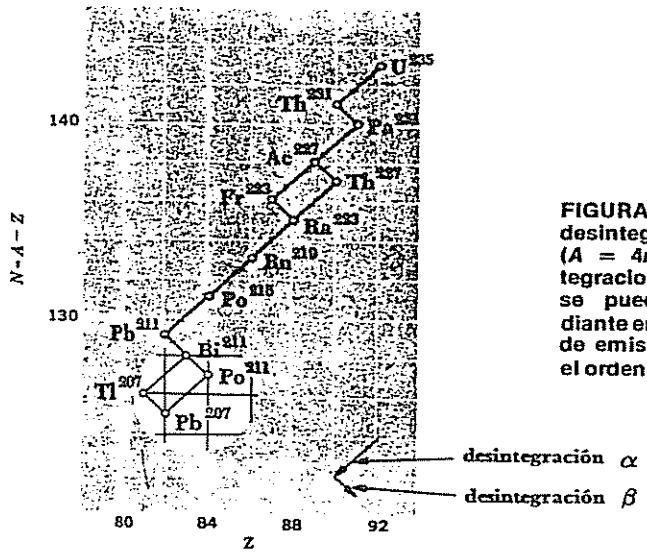


FIGURA 12-5 Serie de desintegración del actinio ($A = 4n + 3$). Las desintegraciones del $^{227}_{89}$Ac y $^{211}_{83}$Bi se pueden producir mediante emisión alfa, seguida de emisión beta, o bien en el orden inverso.

torio, tiene una probabilidad del 66.3% de desintegración beta, dando $^{212}_{84}$Po y un 33.7% de desintegración alfa en $^{208}_{81}$Tl. La desintegración beta va seguida de una posterior desintegración alfa, y ésta de otra beta, de modo que las dos ramas conducen al $^{208}_{82}$Pb.

Varios núclidos alfa-radiactivos de números atómicos no superiores a 82 se encuentran en la naturaleza, aunque no sean muy abundantes.

12.3 LA DESINTEGRACION ALFA

Puesto que las fuerzas de atracción entre nucleones son de corto alcance, la fuerza total de enlace en un núcleo es aproximadamente proporcional al número de nucleones que contiene, esto es, al número de masa A. Sin embargo, las fuerzas de repulsión electrostática entre protones son de alcance ilimitado y la energía de rompimiento total en un núcleo es aproximadamente proporcional a Z^2. Los núcleos que contienen 210 o más nucleones son tan grandes, que las fuerzas nucleares de corto alcance que los mantienen juntos son difícilmente capaces de equilibrar la repulsión mutua de los protones. La desintegración alfa en tales núcleos se presenta como un medio de aumentar su estabilidad por reducción de su tamaño.

¿Por qué las partículas emitidas son invariablemente partículas alfa en lugar de, por ejemplo, protones o núcleos $^3_2$He? La respuesta se debe a la alta energía de enlace de la partícula alfa. Para poder escapar de un núcleo, una partícula debe tener energía cinética suficiente. La masa de la partícula alfa es más pequeña que la de los nucleones constituyentes para que tal energía esté disponible. Para ilustrar este punto, podemos calcular, a partir de las masas conocidas de cada partícula y de las de los núcleos padres e hijos, la energía cinética Q, liberada cuando un núcleo pesado emite varias partículas. Esta viene dada por

$$Q = (m_i - m_f - m_\alpha)c^2$$

donde m_i es la masa del núcleo inicial, m_f la del núcleo final y m_α la de la partícula alfa. Se encuentra que *sólo* la emisión de una partícula alfa es energéticamente posible; otros tipos de desintegración requerirían que le fuese suministrada energía exterior al núcleo. Así, la desintegración alfa en el $^{232}_{92}$U está acompañada de la liberación de 5.4 MeV, mientras que si se emitiese un protón, habría que suministrar 6.1 MeV y 9.6 MeV si se emitiese un núcleo $^3_2$He. Las energías observadas en la desintegración alfa concuerdan con los valores predichos a partir de las masas nucleares implicadas.

La energía cinética T_α de la partícula alfa emitida no es nunca igual a la energía de desintegración Q porque, si se quiere conservar el momentum, el núcleo retrocede con una pequeña cantidad de energía cinética cuando emerge la partícula alfa. Es fácil demostrar que, como consecuencia de la conservación de la energía y del momentum, T_α está relacionado con Q y con el número de masa A del núcleo original mediante

$$T_\alpha \approx \frac{A-4}{A} Q$$

Los números de masa de casi todos los emisores de partículas alfa son superiores a 210, de modo que gran parte de la energía de desintegración aparece como energía cinética de la partícula alfa. En la desintegración del $^{222}_{86}$Rn, $Q = 5.587$ MeV, mientras que $T_\alpha = 5.486$ MeV.

Aunque un núcleo pesado puede en principio reducir su tamaño espontáneamente por desintegración alfa, subsiste todavía el problema de cómo puede escapar realmente la partícula alfa del núcleo. La Fig. 12-6 es una representación de la energía potencial V de la partícula alfa en función de su distancia r al centro de un núcleo pesado. La altura de la barrera de potencial es aproximadamente de 25 MeV, esto es, igual al trabajo que se debe realizar contra la fuerza de repulsión electrostática para llevar una partícula alfa desde el infinito a una posición próxima al núcleo, pero exactamente fuera de la zona de fuerzas atractivas. Podemos considerar, por tanto, que una partícula alfa en un núcleo es como si estuviese dentro de una caja y que necesitase una energía de 25 MeV para remontar sus paredes. No obstante, las partículas alfa en desintegración tienen energías que van desde 4 a 9 MeV según se trate de un tipo particular de núclido o de otro, de 16 a 21 MeV menos que la energía necesaria para escapar.

Mientras que la desintegración alfa es inexplicable a la luz de los principios clásicos, la mecánica cuántica suministra una explicación clara. En efecto, la teoría de desintegración alfa, desarrollada independientemente por Gamow y por Gurney y Condon, en 1928, se recibió como una sorprendente confirmación de la

mecánica cuántica. En las dos secciones siguientes demostraremos cómo, aun en el caso de tratar el problema del escape de una partícula alfa de un núcleo en forma simplificada, obtenemos resultados de acuerdo con la experimentación.

Los principios básicos de esta teoría son los siguientes:

1. Una partícula alfa puede existir como una entidad dentro del núcleo;
2. La partícula está en constante movimiento y está encerrada en el núcleo por medio de la barrera de potencial que lo rodea.
3. Existe una pequeña probabilidad, pero definida, de que la partícula pueda pasar a través de la barrera (a pesar de su altura) cada vez que se produce un choque.

De este modo, la probabilidad de desintegración por unidad de tiempo λ se puede expresar como

$$\lambda = \nu P$$

donde ν es el número de veces por segundo que una partícula alfa, dentro de un núcleo, golpea la barrera de potencial que lo rodea, y P la probabilidad de que la partícula traspase la barrera. Si suponemos que en un momento hay en el núcleo una sola partícula alfa y que se mueve hacia adelante y hacia atrás a lo largo de su diámetro, tenemos,

$$\nu = \frac{v}{2R}$$

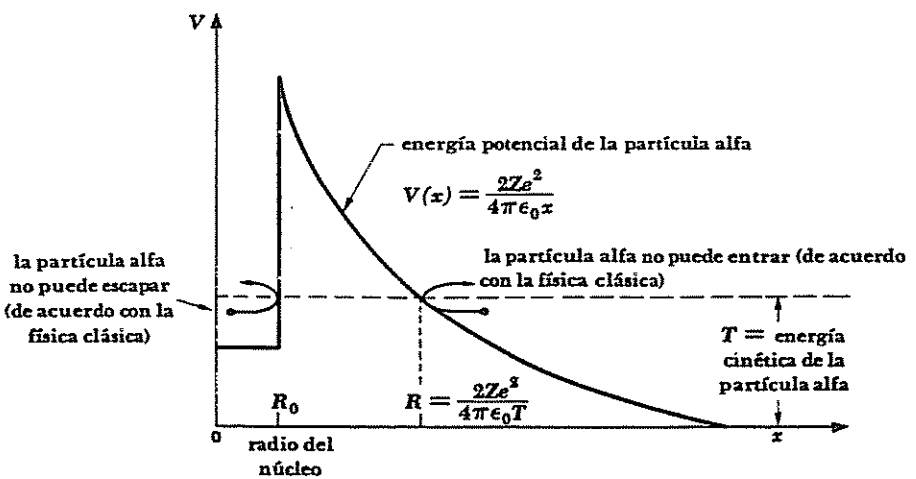


FIGURA 12-6 Energía potencial de una partícula alfa en función de su distancia al centro del núcleo.

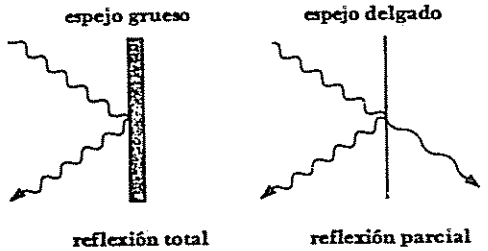


FIGURA 12-7 Una onda incidente penetra aun una superficie perfectamente reflectora a lo largo de un pequeño espacio, y puede atravesarla si la superficie es lo suficientemente delgada.

donde v es la velocidad de la partícula alfa cuando eventualmente abandona el núcleo y R el radio del núcleo. Unos valores típicos de v y R pueden ser 2×10^7 m/s y 10^{-14} m, respectivamente, de modo que

$$\nu \approx 10^{21}\ \text{s}^{-1}$$

La partícula alfa choca con las paredes que la confinan 10^{21} veces por segundo y, sin embargo, tiene que esperar 10^{10} años para poder escapar de algunos núcleos.

Puesto que $V > E$, la física clásica predice una probabilidad P de trasmisión igual a cero. En mecánica cuántica, una partícula alfa en movimiento se considera como una onda, de modo que hay un valor pequeño, pero finito, para P. La analogía óptica de este efecto es bien conocida: una onda luminosa que sufre una reflexión, aunque se trate de un espejo perfecto, sufre una disminución exponencial de la amplitud antes de invertir su dirección (Fig. 12-7).

*12.4 PENETRACION DE BARRERA

Consideremos el caso de un haz de partículas de energía cinética T que inciden por el lado izquierdo de una barrera de potencial de altura V y anchura L, Fig. 12-8. A ambos lados de la barrera $V = 0$, lo que quiere decir que aquí no actúan fuerzas sobre la partícula. En estas regiones, la ecuación de Schrödinger para la partícula es

$$\text{12.13} \qquad \frac{\partial^2\psi_{\text{I}}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_{\text{I}} = 0$$

y

$$\text{12.14} \qquad \frac{\partial^2\psi_{\text{III}}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_{\text{III}} = 0$$

Supongamos que

$$\text{12.15} \qquad \psi_{\text{I}} = Ae^{iax} + Be^{-iax}$$

$$\text{12.16} \qquad \psi_{\text{III}} = Ee^{iax} + Fe^{-ia\cdot x}$$

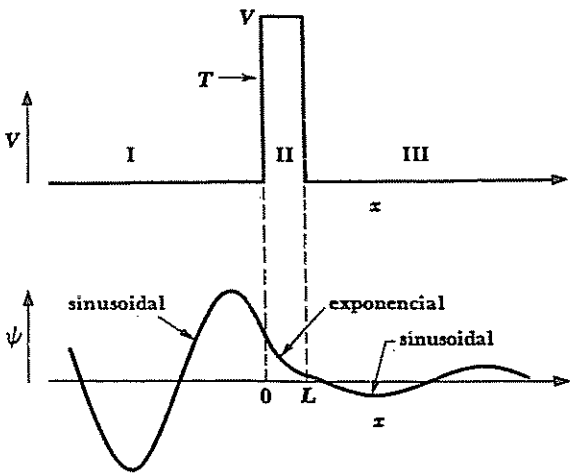


FIGURA 12-8 Un haz de partículas puede "escapar" a través de una barrera finita.

son soluciones de las Ecs. 12.13 y 12.14, respectivamente. Los diversos términos de estas soluciones no son difíciles de interpretar. Según se muestra esquemáticamente en la Fig. 12-8, Ae^{iax} es una onda de amplitud A que incide por el lado izquierdo de la barrera. Esto es,

12.17 $$\psi_{I+} = Ae^{iax}$$

Esta onda corresponde al haz de partículas incidente en el sentido de que $|\psi_{I+}|^2$ es su densidad de probabilidad. Si v es la velocidad de grupo de la onda, igual a la de la partícula, tendremos

12.18 $$|\psi_{I+}|^2 v$$

que es el flujo de partículas que llegan a la barrera. Para $x = 0$, la onda incidente golpea la barrera y es parcialmente reflejada, con lo que

12.19 $$\psi_{I-} = Be^{-iax}$$

representa la onda reflejada (Fig. 12-9). Por tanto,

12.20 $$\psi_I = \psi_{I+} + \psi_{I-}$$

En el extremo de la barrera ($x > L$) puede haber solamente una onda

$$\psi_{III+} = Ee^{iax}$$

que viaja en la dirección y el sentido $+x$, puesto que, por hipótesis, no hay nada en la región III que pudiera reflejar la onda. Por tanto,

$$F = 0$$

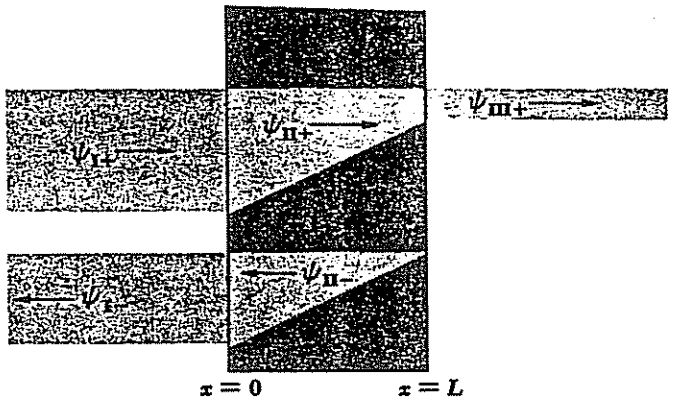


FIGURA 12-9 Una representación esquemática de la penetración de una barrera.

y

12.21 $$\psi_{III} = \psi_{III+} = Ee^{iax}$$

Sustituyendo ψ_I y ψ_{III} en sus respectivas ecuaciones diferenciales, encontramos

12.22 $$a = \sqrt{\frac{2mT}{\hbar^2}}$$

Es evidente que la probabilidad de trasmisión P para que una partícula pase a través de la barrera, es la relación entre la densidad de probabilidad en la región III y en la región I es

12.23 $$P = \frac{|\psi_{III}|^2}{|\psi_I|^2} = \frac{EE^*}{AA^*}$$

De acuerdo con los enunciados clásicos, $P = 0$ porque la partícula no puede existir en el interior de la barrera; veamos qué resultados da la mecánica cuántica.

En la región II, la ecuación de Schrödinger para las partículas es

12.24 $$\frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(T - V)\psi_{II} = 0$$

Su solución es

12.25 $$\psi_{II} = Ce^{ibx} + De^{-ibx}$$

donde

12.26 $$b = \sqrt{\frac{2m(T - V)}{\hbar^2}}$$

www.elsolucionario.org

Puesto que $V > T$, b es imaginario, de modo que podemos definir un nuevo número de onda b' mediante

$$b' = -ib$$

12.27 $$= \sqrt{\frac{2m(V-T)}{\hbar^2}}$$

Por tanto,

12.28 $$\psi_{II} = Ce^{-b'x} + De^{b'x}$$

El término

12.29 $$\psi_{II+} = Ce^{-b'x}$$

es una función de onda exponencialmente decreciente que corresponde a una perturbación no oscilatoria a la derecha de la barrera. Dentro de la barrera se refleja parte de la perturbación, y

12.30 $$\psi_{II-} = De^{b'x}$$

es una función de onda exponencialmente decreciente que corresponde a la perturbación reflejada a la izquierda.

Aun cuando ψ_{II} no oscile, y por tanto no represente una partícula en movimiento de energía cinética positiva, la densidad de probabilidad $|\psi_{II}|^2$ no es cero. Hay una probabilidad finita de encontrar la partícula dentro de la barrera. Una partícula en el extremo final de la barrera y que no sea reflejada, emergerá en la región III con la misma energía cinética T que originalmente tenía y su función de onda será ψ_{III}, ya que continuará cinética T que originalmente tenía y su función y el sentido $+x$. En el límite de una barrera infinitamente ancha $\psi_{III} = 0$, esto implica que todas las partículas incidentes son reflejadas. Sin embargo, el proceso de reflexión tiene lugar *dentro* de la barrera y no en su pared izquierda. Una barrera de anchura finita permite que una fracción P del haz inicial la atraviese.

Para calcular P, debemos aplicar ciertas condiciones límite a ψ_I, ψ_{II} y ψ_{III}. La Fig. 12-8 es una representación esquemática de las funciones de onda en las regiones I, II y III que pueden ayudar a comprender las condiciones límite. Según quedó establecido previamente, ψ y su derivada $\partial\psi/\partial x$ deben ser continuas en todos los casos. Con respecto a la Fig. 12-8, esto significa que, en cada una de las paredes de la barrera, las funciones de onda dentro y fuera de ellas no solamente deben tener el mismo valor sino también la misma pendiente, de modo que coincidan perfectamente. Por tanto, en la pared izquierda de la barrera,

12.31a $$\psi_I = \psi_{II}$$

12.31b $$\frac{\partial\psi_I}{\partial x} = \frac{\partial\psi_{II}}{\partial x} \quad \Big\} \; x = 0$$

y en la derecha

12.32a $$\psi_{II} = \psi_{III}$$

12.32b $$\frac{\partial\psi_{II}}{\partial x} = \frac{\partial\psi_{III}}{\partial x} \quad \Big\} \; x = L$$

Sustituyendo ψ_I, ψ_{II} y ψ_{III} de las Ecs. 12.15, 12.28 y 12.21 en estas ecuaciones, da

12.33 $$A + B = C + D$$

12.34 $$iaA - iaB = -b'C + b'D$$

12.35 $$Ce^{-b'L} + De^{b'L} = Ee^{iaL}$$

12.36 $$-aCe^{-b'L} + aDe^{b'L} = iaEe^{iaL}$$

Las Ecs. 12.33 a 12.36 se resuelven fácilmente para obtener

12.37 $$\left(\frac{A}{E}\right) = \left[\frac{1}{2} + \frac{i}{4}\left(\frac{b'}{a} - \frac{a}{b'}\right)\right] e^{(ia+b')L} + \left[\frac{1}{2} - \frac{i}{4}\left(\frac{b'}{a} - \frac{a}{b'}\right)\right] e^{(ia-b')L}$$

El complejo conjugado de A/E, necesario para calcular la probabilidad de trasmisión P, se halla sustituyendo i por $-i$ en A/E, dondequiera que se presente,

12.38 $$\left(\frac{A}{E}\right)^* = \left[\frac{1}{2} - \frac{i}{4}\left(\frac{b'}{a} - \frac{a}{b'}\right)\right] e^{(-ia+b')L} + \left[\frac{1}{2} + \frac{i}{4}\left(\frac{b'}{a} - \frac{a}{b'}\right)\right] e^{(-ia-b')L}$$

Supongamos que la barrera de potencial es alta en relación con la energía cinética de una partícula incidente; esto significa que $b' > a$ y

12.39 $$\left(\frac{b'}{a} - \frac{a}{b'}\right) \approx \frac{b'}{a}$$

Supongamos que la barrera de potencial es relativamente ancha para que ψ_{II} sea fuertemente atenuada entre $x = 0$ y $x = L$; esto quiere decir que $b'L \gg 1$ y

12.40 $$e^{b'L} \gg e^{-b'L}$$

Por tanto, las Ecs. 12.37 y 12.38 se pueden aproximar a

12.41 $$\left(\frac{A}{E}\right) = \left(\frac{1}{2} + \frac{ib'}{4a}\right) e^{(ia+b')L}$$

y

12.42 $$\left(\frac{A}{E}\right)^* = \left(\frac{1}{2} - \frac{ib'}{4a}\right) e^{(-ia+b')L}$$

Multiplicando (A/E) por $(A/E)^*$ se tiene

$$\left(\frac{A}{E}\right)\left(\frac{A}{E}\right)^* = \left(\frac{1}{4} + \frac{b'^2}{16a^2}\right) e^{2b'L}$$

de modo que la probabilidad de trasmisión P es

$$P = \frac{EE^*}{AA^*} = \left[\left(\frac{A}{E}\right)\left(\frac{A}{E}\right)^*\right]^{-1}$$

12.43
$$= \left[\frac{16}{4 + (b'/a)^2}\right] e^{-2b'L}$$

Puesto que, con base en las definiciones de a (Ec. 12.22) y b' (Ec. 12.27)

$$\left(\frac{b'}{a}\right)^2 = \frac{V}{T} - 1$$

la variación del coeficiente exponencial de la Ec. 12.43 con T y V es despreciable, comparada con la variación de la misma. El coeficiente, además, no es muy diferente de la unidad, de modo que

12.44
$$P \approx e^{-2b'L}$$

es una buena aproximación para la probabilidad de trasmisión. Es conveniente escribir la Ec. 12.44 de la siguiente manera

12.45
$$\ln P = -2b'L$$

*12.5 TEORIA DE LA DESINTEGRACION ALFA

La ecuación 12.45 se obtiene para una barrera de potencial rectangular, mientras que una partícula alfa dentro del núcleo se encuentra enfrente de una barrera de altura variable (Fig. 12-6). Por tanto, tenemos que sustituir $\ln P = -2b'L$ por

12.46
$$\ln P = -2\int_0^L b'(x)\,dx = -2\int_{R_0}^R b'(x)\,dx$$

donde R_0 es el radio del núcleo y R la distancia desde el centro hasta $V = T$. Más allá de R, la energía cinética de la partícula alfa es positiva y se puede mover libremente (Fig. 12.10). Ahora

$$V(x) = \frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 x}$$

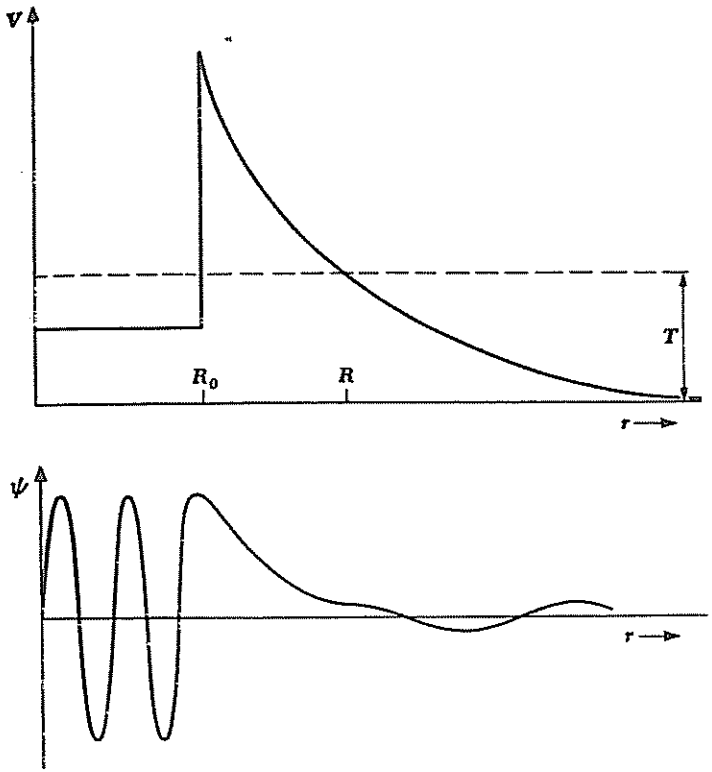


FIGURA 12-10 Desintegración alfa desde el punto de vista de la mecánica ondulatoria.

es la energía potencial electrostática de una partícula alfa a una distancia x del centro de un núcleo de carga Ze (Ze es la carga del núcleo *menos* la carga de la partícula alfa $2e$). Por tanto, tenemos

$$b' = \sqrt{\frac{2m(V - T)}{\hbar^2}}$$
$$= \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \left(\frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 x} - T\right)^{1/2}$$

y, dado que $T = V$ cuando $x = R$,

$$b' = \left(\frac{2mT}{\hbar^2}\right)^{1/2} \left(\frac{R}{x} - 1\right)^{1/2}$$

Por tanto,

$$\ln P = -2\int_{R_0}^{R} b'(x)\,dx$$

$$= -2\left(\frac{2mT}{\hbar^2}\right)^{1/2}\int_{R_0}^{R}\left(\frac{R}{x}-1\right)^{1/2}dx$$

12.47 $$= -2\left(\frac{2mT}{\hbar^2}\right)^{1/2} R\left[\cos^{-1}\left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2} - \left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2}\left(1-\frac{R_0}{R}\right)^{1/2}\right]$$

Puesto que la barrera de potencial es relativamente ancha, $R \gg R_0$, y

$$\cos^{-1}\left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2} \approx \frac{\pi}{2} - \left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2}$$

$$\left(1-\frac{R_0}{R}\right)^{1/2} \approx 1$$

con lo que resulta que

$$\ln P = -2\left(\frac{2mT}{\hbar^2}\right)^{1/2} R\left[\frac{\pi}{2} - 2\left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2}\right]$$

Sustituyendo R por

$$R = \frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 T}$$

se obtiene

12.48 $$\ln P = \frac{4e}{\hbar}\left(\frac{m}{\pi\varepsilon_0}\right)^{1/2} Z^{1/2}R_0^{1/2} - \frac{e^2}{\hbar\varepsilon_0}\left(\frac{m}{2}\right)^{1/2} ZT^{-1/2}$$

El resultado de calcular las diversas constantes de la ecuación 12.48 es

$$\ln P = 2.97Z^{1/2}R_0^{1/2} - 3.95ZT^{-1/2}$$

donde T (energía cinética de la partícula alfa) se expresa en MeV, R_0 (radio del núcleo) en unidades fm($1\ \text{fm} = 10^{-15}\ \text{m}$) y Z es el número atómico del núcleo menos la partícula alfa. La constante de desintegración λ dada por

$$\lambda = \nu P$$

$$= \frac{v}{2R}P$$

puede escribirse como

12.49 $$\ln\lambda = \ln\left(\frac{v}{2R_0}\right) + 2.97Z^{1/2}R_0^{1/2} - 3.95ZT^{-1/2}$$ Desintegración alfa

Para expresar la Ec. 12.49 en términos de logaritmos comunes, observamos que

$$\ln A = \frac{\log_{10} A}{\log_{10} e} = \frac{\log_{10} A}{0.4343}$$

y así

$$\log_{10}\lambda = \log_{10}\left(\frac{v}{2R_0}\right) + 0.4343(2.97Z^{1/2}R_0^{1/2} - 3.95ZT^{-1/2})$$

$$= \log_{10}\left(\frac{v}{2R_0}\right) + 1.29Z^{1/2}R_0^{1/2} - 1.72ZT^{-1/2}$$

La Fig. 12-11 es una representación del $\log_{10}\lambda$ en función de $ZT^{-1/2}$ para diversos núclidos alfa-radiactivos. La recta obtenida con los datos experimentales tiene una pendiente de -1.72, prevista para todo el campo de constantes de desintegración. Por medio de la posición de la recta se puede determinar R_0 el radio nuclear. El resultado coincide con el que se obtuvo por medio de experimentos de dispersión nuclear (como los de Rutherford) y da $\sim$10 fm en núcleos muy pesados. Este es un método independiente para determinar el tamaño del núcleo.

El análisis mecánico-cuántico de la emisión de partículas alfa, que por otro lado concuerda totalmente con los datos observados, presenta dos aspectos significativos. El primero es el que hace comprensible la enorme variación de la vida media con la energía de desintegración. La desintegración más lenta es la del

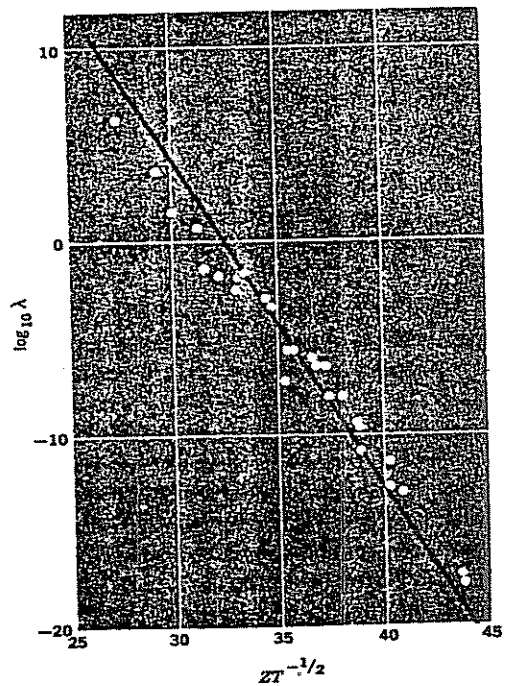


FIGURA 12-11 Verificación experimental de la teoría de la desintegración alfa.

www.elsolucionario.org

$^{232}_{90}$Th, cuya vida media es 1.3×10^{10} años, y la más rápida es la del $^{212}_{84}$Po, con 3.0×10^{-7} seg. Mientras que su vida media es 10^{24} veces mayor, la energía de desintegración del $^{232}_{90}$Th (4.05 MeV) es solamente del orden de la mitad de la del $^{212}_{84}$Po (8.95 MeV). Este comportamiento lo predice la Ec. 12.49.

El segundo aspecto importante de la teoría de la desintegración alfa es la explicación que da del fenómeno en función de la penetración de una barrera de potencial por una partícula que no tiene energía suficiente para remontarla. En la física clásica, esta penetración no se puede presentar: Un lanzamiento de beisbol contra la Gran Muralla de China tiene, según la física clásica, una probabilidad nula de pasarla. Para la mecánica cuántica, la probabilidad no es mucho mayor que cero, pero *no* es exactamente nula.

12.6 LA DESINTEGRACION BETA

La desintegración beta, como la alfa, es un medio por el que un núcleo puede alterar su relación Z/N para dar lugar a una mayor estabilidad. La desintegración beta representa, sin embargo, un problema considerablemente mayor para los físicos que tratan de comprender fenómenos naturales. El problema principal es que en la desintegración beta, el núcleo emite un electrón y, por otro lado, según se vio en el capítulo anterior, existen poderosos argumentos en contra de la presencia de electrones en el núcleo. Puesto que la desintegración beta es esencialmente la tranformación espontánea de un neutrón en un protón y un electrón, esta dificultad desaparece si suponemos que el electrón abandona el núcleo inmediatamente después de su creación. Una dificultad más seria se debe a que las observaciones de la desintegración beta revelan que los tres principios de conservación (de la energía, del momentum y del momentum angular) aparentemente se violan.

Las energías del electrón observadas en la desintegración beta de un núclido determinado varían *continuamente* desde 0 hasta un valor máximo $T_{máx}$, característico del núclido. La Fig. 12-12 muestra el espectro de energía de los electrones emitidos en la desintegración beta del $^{210}_{83}$ Bi; aquí $T_{máx} = 1.17$ MeV. En cada caso, la energía máxima

$$E_{máx} = m_0c^2 + T_{máx}$$

desarrollada por el electrón en desintegración es igual a la energía equivalente a la diferencia de masa entre los núcleos padres e hijos. Rara vez se encuentra, sin embargo, un electrón emitido con una energía $T_{máx}$.

Al principio se sospechaba que la energía de "pérdida" desaparecía durante los choques entre el electrón emitido y los electrones atómicos que rodean al núcleo. Un primer experimento, realizado en 1927, demostró que esta hipótesis no era correcta. En el experimento se colocó una muestra de un núclido beta-radiactivo en un calorímetro y se midió el calor producido en un número dado de desintegraciones. El calor producido, dividido entre el número de desintegraciones, da la energía media por desintegración. En el caso de $^{210}_{83}$Bi , la energía media encontrada fue de 0.35 MeV, que está muy próxima a los 0.39 MeV de la media del espectro de la Fig. 12-12, pero muy lejos de los 1.17 MeV del valor de $T_{máx}$. De esto se desprende que el espectro continuo observado representa la distribución real de energías de los electrones emitidos por núcleos beta-radiactivos.

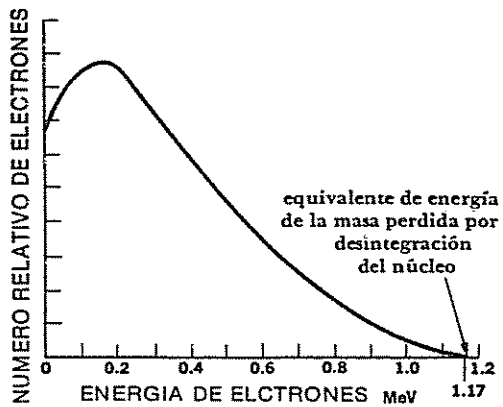


FIGURA 12-12 Espectro de energía de los electrones en la desintegración beta del $^{210}_{83}$Bi.

También se ha visto que el momento linear y el angular no se conservan en la desintegración beta. En la desintegración beta de ciertos núclidos se pueden observar las direcciones de los electrones emitidos y de los núcleos de retroceso; casi nunca son exactamente opuestos, como lo exigiría la conservación del momentum. La falta de conservación del momentum angular se debe al valor de $\frac{1}{2}$ para los spines del electrón, del protón y del neutrón. La desintegración beta implica la conversión de un neutrón en un protón:

$$n \rightarrow p + e^-$$

Puesto que el spin de cada partícula es $\frac{1}{2}$, la reacción no puede tener lugar si el spin (y, por tanto, el momentum angular) se tiene que conservar.

En 1930, Pauli propuso que si una partícula sin carga, de masa pequeña o nula, y spin $\frac{1}{2}$ se emite en una desintegración beta junto con el electrón, las discrepancias encontradas en la referente a la energía, momentum y momento angular serían eliminadas. Se supuso que esta partícula, conocida más tarde con el nombre de *neutrino*, tenía una energía igual a la diferencia entre $T_{máx}$ y la energía cinética real del electrón (el núcleo de retroceso posee una energía cinética despreciable) y así su momentum está exactamente equilibrado con el del electrón y el del núcleo de retroceso resultante. Posteriormente, se encontró que hay *dos* clases de neutrinos implicados en la desintegración beta: el neutrino propiamente dicho (símbolo ν.) y el antineutrino (símbolo $\bar{\nu}$). En el capítulo 13 se estudiará la diferencia entre ellos. En la desintegración beta ordinaria es un antineutrino el que se emite:

12.50 $$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}$$ Desintegración beta

La hipótesis del neutrino ha resultado afortunada. Se esperaba que su masa fuese una pequeña fracción de la del electrón, puesto que se observó que el valor de $T_{máx}$ era igual (dentro del error experimental) al valor calculado a partir de la diferencia de masas entre padre e hijo; hoy se cree que la masa del neutrino es cero. La razón por la que los neutrinos no fueron detectados experimentalmente hasta hace poco, se debe a que sus interacciones con la materia son sumamente débiles. Al carecer de carga y masa y no tener carácter electromagnético como el fotón, el neutrino puede pasar sin impedimento alguno a través de una gran cantidad de materia. Un neutrino tendría que pasar a través de una masa de hierro sólido durante 1,000 *años luz* antes de entrar en interacción con ella. La única interacción que puede experimentar un neutrino con la materia es por medio de un proceso conocido como *desintegración beta inversa*, que explicaremos brevemente.

Los electrones positivos, llamados normalmente *positrones*, se descubrieron en 1932, y dos años después se comprobó que eran emitidos espontáneamente por ciertos núcleos. Las propiedades del positrón son idénticas a las del electrón, excepto en que posee una carga de $+e$, en lugar de $-e$. La emisión del positrón corresponde a la conversión de un protón nuclear en un neutrón, un positrón y un neutrino

12.51 $$p \rightarrow n + e^+ + \nu$$ Emisión positrónica

Mientras que un neutrón exterior a un núcleo puede sufrir desintegración beta negativa para dar un protón debido a que su masa es mucho mayor que la del protón, éste, más ligero, no se puede transformar en un neutrón, excepto dentro del núcleo. La emisión del positrón da lugar a un núcleo resultante de número atómico Z inferior, mientras que el número de masa A permanece invariable.

Estrechamente relacionado con la emisión del positrón está el fenómeno de *captura electrónica*. En ella, un núcleo absorbe uno de los electrones de su órbita más interna, con lo que resulta que un protón se transforma en un neutrón y se emite un neutrino. La reacción fundamental de esta captura es

12.52 $$p + e^- \rightarrow n + \nu$$ Captura electrónica

La captura electrónica está en competencia con la emisión positrónica, ya que ambos procesos conducen a la misma transformación nuclear. La captura del electrón ocurre con mayor frecuencia que la emisión del positrón en elementos pesados, debido a que en ellos las órbitas de los electrones tienen los radios más pequeños. La mayor proximidad de los electrones facilita la interacción con el núcleo. Como casi todos los núcleos inestables encontrados en la naturaleza son de número Z elevado, la emisión positrónica se descubrió varias décadas después de haberse establecido la del electrón.

12.7 DESINTEGRACION BETA INVERSA

La desintegración beta de un protón dentro de un núcleo se realiza de acuerdo con el esquema

12.53 $$p \rightarrow n + e^+ + \nu$$

Puesto que la absorción de un electrón por un núcleo es equivalente a la emisión de un positrón, la reacción de captura del electrón

12.54 $$p + e^- \rightarrow n + \nu$$

es esencialmente la misma que la desintegración beta de la Ec. 12.53. De modo similar, la absorción de un antineutrino es equivalente a la emisión de un neutrino, de manera que la reacción

12.55 $$p + \bar{\nu} \rightarrow n + e^+$$

implica también el mismo proceso físico que el de la Ec. 12.53. Esta reacción, llamada *desintegración beta inversa*, es interesante porque proporciona un método para confirmar la existencia real de los neutrinos.

A principios de 1953, F. Reines, C.L. Cowan y otros empezaron una serie de experimentos para detectar el flujo inmenso de neutrinos procedentes de las desintegraciones beta que se producen en un reactor nuclear. Un depósito de agua que contenía un compuesto de cadmio en solución proporcionaba los protones que interactuaban con los neutrinos incidentes. Rodeando al depósito había un detector de rayos gamma. Inmediatamente después de que un protón absorbía un neutrino para dar un positrón y un neutrón, el positrón encontraba un electrón y ambos se anulaban. El detector de rayos gamma dio una respuesta para la pareja de fotones resultantes de 0.51 MeV. Mientras tanto, el neutrón formado emigraba a través de la solución hasta que, pocos microsegundos después, era capturado por un núcleo de cadmio. El nuevo núcleo de cadmio, más pesado, liberaba alrededor de 8 MeV de la energía de excitación, dividida en tres o cuatro fotones que eran recogidos por el detector unos microsegundos después de la anulación positrón-electrón. En principio, la llegada al detector de una serie de fotones era una señal segura de que la reacción de la Ec. 12.55 había tenido lugar. Con el fin de evitar cualquier indeterminación, el experimento se realizó alternativamente, con el reactor en marcha y parado, de manera que se observó la variación esperada en la frecuencia de captura de neutrinos. De este modo, la existencia del neutrino se puede considerar como experimentalmente establecida.

La desintegración beta inversa es el único medio conocido por el que los neutrinos y los antineutrinos interactúan con la materia:

$$p + \bar{\nu} \rightarrow n + e^+$$
$$n + \nu \rightarrow p + e^-$$

La probabilidad de estas reacciones es casi despreciable; éste es el motivo por el que los neutrinos son capaces de atravesar libremente cantidades tan grandes de materia. Una vez liberados, los neutrinos viajan con libertad por el espacio y la materia indefinidamente, constituyendo una especie de universo independiente dentro del universo de las otras partículas.

12.8 DESINTEGRACION GAMMA

Los núcleos, como los átomos, pueden existir en estados de energía precisos. Un núcleo excitado se representa por un asterisco escrito después de su símbolo habitual; así, $^{87}_{38}Sr^*$ hace referencia a un $^{87}_{38}Sr$ en estado excitado. Los núcleos excitados vuelven a su estado fundamental por medio de la emisión de fotones cuyas energías corresponden a la diferencia entre los estados inicial y final de la transición de que se trate. Los fotones emitidos por los núcleos tienen valores de energía hasta de varios MeV, y reciben el nombre de *rayos gamma*.

En la Fig. 12-13 se muestra un ejemplo sencillo de la relación entre los niveles de energía y los esquemas de desintegración; representa la desintegración beta desde el $^{27}_{12}Mg$ hasta el $^{27}_{13}Al$. La vida media de la desintegración es de 9.5 min, y puede tener lugar en cualquiera de los dos estados excitados del $^{27}_{13}Al$. Así, el núcleo resultante $^{27}_{13}Al^*$ emprende una o dos desintegraciones gamma para llegar al estado fundamental.

Una alternativa de la desintegración gamma es que un núcleo excitado puede volver en determinados casos a su estado fundamental cediendo la energía de excitación a uno de los electrones orbitales que lo rodean. Se puede pensar que este proceso, conocido como *conversión interna*, es una especie de efecto fotoeléctrico en el que un fotón nuclear es absorbido por un electrón atómico, pero es mejor considerar, de acuerdo con la experiencia, a la conversión interna como la representante de una transferencia directa de la energía de excitación desde un núcleo hasta un electrón. El electrón emitido tiene una energía cinética igual a la pérdida de la energía nuclear de excitación, menos la de enlace del electrón en el átomo.

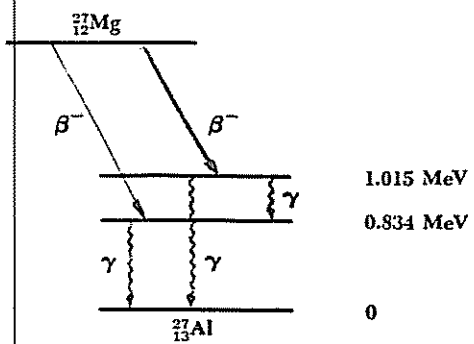


Figura 12-13 Emisiones sucesivas beta y gamma en la desintegración del $^{27}_{12}Mg$ al $^{27}_{13}Al$.

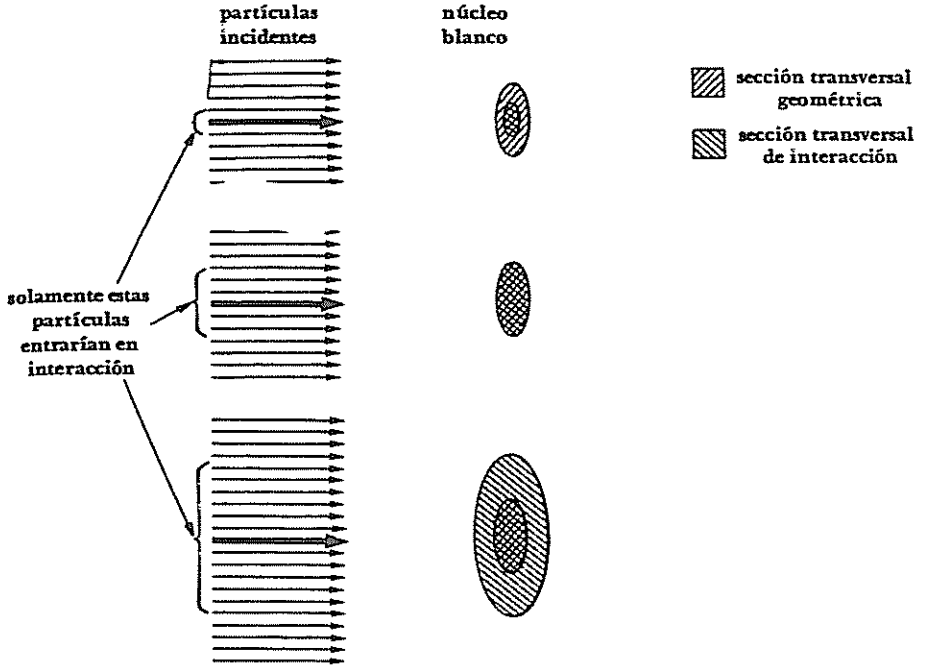


FIGURA 12-14 Concepto de sección transversal. La sección transversal de interacción puede ser menor que, igual a o mayor que la sección transversal geométrica.

Los núcleos más excitados tienen vida media muy corta en relación con la desintegración gamma, pero algunos permanecen excitados durante varias horas. Un núcleo excitado de larga vida recibe el nombre de *isómero* del mismo núcleo en su estado fundamental. El núcleo excitado $^{87}_{38}Sr^*$ tiene una vida media de 2.8 h y es, en consecuencia, un isómero del $^{87}_{38}Sr$.

12.9 SECCION TRANSVERSAL

Las reacciones nucleares, como las reacciones químicas, proporcionan tanto información como un medio de utilizarla de una manera práctica. La mayoría de nuestros conocimientos sobre los núcleos atómicos han sido consecuencia de experimentos en los que partículas energéticas de bombardeo chocan con núcleos blanco estacionarios. Un medio muy conveniente de expresar la probabilidad de que una partícula de bombardeo interactúe de alguna manera con una partícula blanco utiliza la idea de sección transversal, que se introdujo en el Cap. 4 en relación con el experimento de dispersión de Rutherford. Lo que hacemos es considerar que cada partícula blanco presenta un área determinada, denominada sección transversal, a las partículas incidentes (Fig. 12-14). Cualquier partícula

www.elsolucionario.org

incidente que se dirige a esta área interactúa con la partícula blanco. Por eso, cuanto mayor es la sección transversal, mayor es la probabilidad de una interacción. La sección transversal de interacción de una partícula varía con la naturaleza del proceso y con la energía de la partícula incidente; resultado de ello es que pueda ser mayor o menor que la sección geométrica de la partícula.

Supongamos que tenemos una plancha de un material, cuya área es A y su espesor dx (Fig. 12-15). Si el material contiene n átomos por unidad de volumen, hay un total de $nA\,dx$ núcleos en la plancha, ya que su volumen es $A\,dx$. Cada núcleo tiene una sección transversal σ para un tipo particular de interacción, de modo que la sección transversal de todos los núcleos de la plancha es $nA\sigma\,dx$. Si las partículas incidentes en un haz de bombardeo son N, el número dN que interactúa con los núcleos en la plancha viene dado por

$$\frac{\text{partículas que interactúan}}{\text{partículas incidentes}} = \frac{\text{sección transversal de todos los núcleos}}{\text{área del blanco}}$$

$$\frac{dN}{N} = \frac{nA\sigma\,dx}{A}$$

12.56 $$= n\sigma\,dx$$ Sección transversal

Esta ecuación solamente es válida para una plancha de espesor infinitesimal. Para hallar la proporción de partículas incidentes que interactúan con los núcleos en una plancha de espesor finito, debemos integrar dN/N. Si suponemos que cada partícula incidente es capaz de una sola interacción, se puede suponer también que dN partículas se eliminan del haz al pasar a través del primer elemento dx de la plancha. Por tanto, hay que introducir un signo menos en la Ec. 12.56, la que se transforma en

$$-\frac{dN}{N} = n\sigma\,dx$$

Designando el número inicial de partículas incidentes por N_0, tenemos

$$\int_{N_0}^{N} \frac{dN}{N} = -n\sigma \int_0^x dx$$

$$\ln N - \ln N_0 = -n\sigma x$$

12.57 $$N = N_0 e^{-n\sigma x}$$

El número de partículas N que sobreviven disminuye exponencialmente con el aumento del espesor x.

Puesto que las secciones transversales son superficies, se deberían expresar en m^2. Sin embargo, es conveniente y se acostumbra expresarlas en *barns* (b) (1 barn $= 10^{-28}\ m^2$.) El barn es del orden de magnitud de la sección transversal geométrica de un núcleo. Las secciones transversales de la mayor parte de las reacciones nucleares dependen de la energía de la partícula incidente. La Fig. 12-16 muestra cómo la sección transversal de absorción de neutrones del $^{113}_{48}Cd$ varía con la energía de éstos; el estrecho pico de 0.176eV está relacionado con un nivel específico de energía en el núcleo $^{114}_{48}Cd$ resultante.

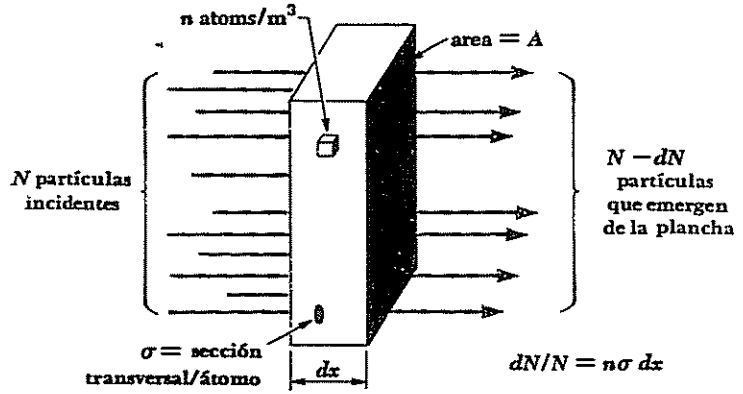


FIGURA 12-15 Relaciones entre la sección transversal y la intensidad del haz.

La trayectoria libre media l de una partícula en un material es la distancia media que puede atravesar antes de interactuar con un núcleo blanco. La probabilidad f que tiene una partícula incidente de sufrir una interacción en una plancha de espesor Δx es

12.58 $$f = n\sigma\,\Delta x$$

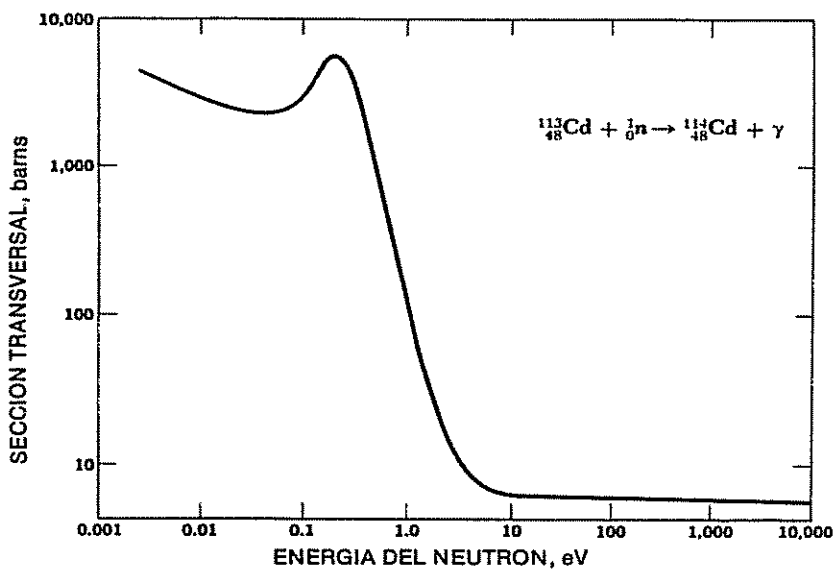


FIGURA 12-16 La sección transversal de absorción de neutrones en el $^{113}_{48}Cd$ varía con la energía de los mismos.

El número de veces H que debe atravesar la plancha antes de entrar en interacción es, por término medio

12.59 $$H = \frac{1}{n\sigma\,\Delta x}$$

La distancia media que la partícula recorre antes de la interacción es, por tanto,

$$H\,\Delta x = \frac{1}{n\sigma}$$

que es, por definición, la trayectoria libre media. Por tanto,

12.60 $$l = \frac{1}{n\sigma}$$ Trayectoria libre media

Se ha encontrado que la sección transversal para la interacción de un neutrino con la materia es aproximadamente 10^{-47} m^2. Empleamos la ecuación 12.60 para hallar la trayectoria libre media de los neutrinos en el hierro sólido. El peso atómico del hierro es 55.9, de manera que la masa de un átomo de hierro es, en promedio

$$m_{Fe} = 55\,9 \text{ u/átomo} \times 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg/u}$$
$$= 9.3 \times 10^{-26} \text{ kg/átomos}$$

Como la densidad del hierro es 7.8×10^3 kg/m^3, el número de átomos por m^3 en el hierro es

$$n = \frac{7.8 \times 10^3 \text{ kg/m}^3}{9.3 \times 10^{-26} \text{ kg/átomos}}$$
$$= 8.4 \times 10^{28} \text{ átomos/m}^3$$

Por tanto, la trayectoria libre media de los neutrinos en el hierro es

$$l = \frac{1}{n\sigma} = \frac{1}{8.4 \times 10^{28} \text{ átomos/m}^3 \times 10^{-47} \text{ m}^2}$$
$$= 1.2 \times 10^{18} \text{ m}$$

Un año luz (la distancia que recorre la luz en el espacio libre durante un año) es igual a 9.46×10^{15} m, y así, la trayectoria libre media resulta ser

$$l = \frac{1.2 \times 10^{18} \text{ m}}{9.46 \times 10^{15} \text{ m/años luz}} = 130 \text{ años luz}$$

en el hierro sólido! Un inmenso flujo de neutrinos se produce en el Sol y otras estrellas en el curso de las reacciones nucleares que ocurren dentro de ellas, y este flujo se mueve prácticamente sin impedimento a través del universo. Hay muchos

más neutrinos que átomos en el universo, y su número continúa creciendo. La energía que transportan los neutrinos —aparentemente— se pierde para siempre en el sentido de que no se puede transformar.

12.10 EL NUCLEO COMPUESTO

Muchas de las reacciones nucleares suponen en la realidad dos etapas distintas. En la primera, una partícula incidente golpea a un núcleo-blanco y ambas partículas se combinan para dar un nuevo núcleo llamado *núcleo compuesto*. La masa y el número atómico de este nuevo núcleo son, respectivamente, la suma de los números atómicos de las partículas originales y de sus números de masa. El núcleo compuesto no tiene "memoria" de cómo ha sido formado, puesto que los nucleones se encuentran mezclados sin tener en cuenta su origen, y la energía que aporta la partícula incidente se reparte entre todos ellos. Un núcleo compuesto puede formarse, por tanto, de diversas maneras. Para explicarlo, la Tabla 12-2 muestra seis reacciones cuyo producto es el núcleo compuesto $^{14}_{7}N^{*}$. (El asterisco significa que se trata de un estado excitado; los núcleos compuestos están excitados invariablemente por una energía igual, cuando menos, a la energía de enlace de las partículas en ellos.) A pesar de que el $^{13}_{7}N$ y el $^{11}_{6}C$ son beta-radiactivos, de vida media tan breve que impide hacer un estudio detallado de sus reacciones para formar el $^{14}_{7}N^{*}$, no hay duda de que se pueden producir estas reacciones.

Los núcleos compuestos tienen vidas del orden de 10^{-16} s que, aunque pequeñas para poder observarlas directamente, son relativamente grandes al compararlas con los 10^{-21} s necesarios para que una partícula nuclear con una energía de varios MeV pase a través del núcleo. Un núcleo compuesto dado se puede desintegrar de una o de varias maneras distintas, dependiendo de su energía de excitación. Así, el

Tabla 12.2

REACCIONES NUCLEARES CUYO PRODUCTO ES EL NUCLEO COMPUESTO $^{14}_{7}N^{*}$. La excitación de las energías dadas se calcula a partir de las masas de las partículas involucradas; la energía cinética de una partícula incidente se sumará a la energía de excitación en una cantidad que depende de la dinámica de su reacción.

$^{13}_{7}N + {}^{1}_{0}n \rightarrow {}^{14}_{7}N^{*}$ (10.5 MeV)
$^{13}_{6}C + {}^{1}_{1}H \rightarrow {}^{14}_{7}N^{*}$ (7.5 MeV)
$^{12}_{6}C + {}^{2}_{1}H \rightarrow {}^{14}_{7}N^{*}$ (10.3 MeV)
$^{11}_{6}C + {}^{3}_{1}H \rightarrow {}^{14}_{7}N^{*}$ (22.7 MeV)
$^{11}_{5}B + {}^{3}_{2}He \rightarrow {}^{14}_{7}N^{*}$ (20.7 MeV)
$^{10}_{5}B + {}^{4}_{2}He \rightarrow {}^{14}_{7}N^{*}$ (11.6 MeV)

$^{14}_{7}N^{*}$ que tiene una energía de excitación de 12 MeV, se puede desintegrar de acuerdo con las reacciones

$$^{14}_{7}N^{*} \rightarrow {}^{13}_{7}N + {}^{1}_{0}n$$
$$^{14}_{7}N^{*} \rightarrow {}^{13}_{6}C + {}^{1}_{1}H$$
$$^{14}_{7}N^{*} \rightarrow {}^{12}_{6}C + {}^{2}_{1}H$$
$$^{14}_{7}N^{*} \rightarrow {}^{10}_{5}B + {}^{4}_{2}He$$

o bien, emitir simplemente uno o más rayos gamma de modo que tengan una energía total de 12 MeV, pero *no puede* desintegrarse por emisión de una partícula de tritio ($^{3}_{1}H$) o de helio-3 ($^{3}_{2}He$), ya que no tiene energía suficiente para liberarlas. Normalmente, un tipo determinado de desintegración está favorecido por un núcleo compuesto en un estado excitado específico de energía.

La formación y la desintegración de un núcleo compuesto tienen una interpretación interesante basada en el modelo de la gota líquida, descrito en el Cap. 11. Según este modelo, un núcleo excitado es análogo a una gota de líquido caliente en el que la energía de enlace de las partículas emitidas corresponde al calor de vaporización de las moléculas del líquido. La gota del líquido, al evaporarse varias moléculas, se enfría. El proceso de evaporación se produce cuando las fluctuaciones estadísticas en la distribución de energía dentro de la gota hacen que una molécula tenga la energía suficiente para escapar. Similarmente, un núcleo compuesto permanece en su estado excitado hasta que un nucleón, o grupo de ellos, tenga momentáneamente suficiente energía de excitación para abandonar el núcleo. El intervalo de tiempo entre la formación y la desintegración de un núcleo compuesto se ajusta totalmente a este esquema.

El análisis de la reacción que se presenta cuando un nucleón o núcleo en movimiento choca con otro en reposo se simplifica mucho si se utiliza un sistema de coordenadas que se mueva con el centro de masa de las partículas en choque. Para un observador situado en el centro de masa, las partículas tienen momenta iguales y opuestos (Fig.12-17). Así, si una partícula de masa m_1 y velocidad v incide sobre una partícula estacionaria de masa m_2 como la vería un observador en el laboratorio, la velocidad V del centro de masa se define por la condición

$$m_1(v - V) = m_2 V$$
$$V = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2}\right) v$$

En la mayoría de las reacciones nucleares, $v \ll c$ y, en consecuencia, es satisfactorio abordar el problema de manera no relativista.

En el sistema del laboratorio, la energía cinética total es únicamente la de la partícula incidente:

$$T_{lab} = \tfrac{1}{2} m_1 v^2$$

En el sistema centro-de-masa, ambas partículas están en movimiento y contribuyen a la energía cinética total:

$$T_{cm} = \frac{1}{2} m_1 (v - V)^2 + \frac{1}{2} m_2 V^2$$
$$= \frac{1}{2} m_1 v^2 - \frac{1}{2}(m_1 + m_2) V^2$$
$$= T_{lab} - \frac{1}{2}(m_1 + m_2) V^2$$
$$= \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2}\right) T_{lab} \qquad 12.61$$

La energía cinética total de las partículas relativa al centro de masa es su energía total en el sistema del laboratorio menos la energía cinética $\frac{1}{2}(m_1 + m_2)V^2$ del centro de masa en movimiento. Así, podemos considerar a T_{cm} como la energía cinética del movimiento relativo de las partículas. Cuando chocan las partículas, la cantidad máxima de energía cinética que se puede transformar en energía de excitación del núcleo compuesto resultante, conservándose el momentum, es T_{cm}, que siempre es menor que T_{lab}.

Se puede obtener información sobre los estados excitados de los núcleos a partir de reacciones nucleares, así como de la desintegración radiactiva. La presencia de un estado excitado se puede detectar por un pico en la curva de sección transversal en función de la energía de una reacción particular, como en la reacción de

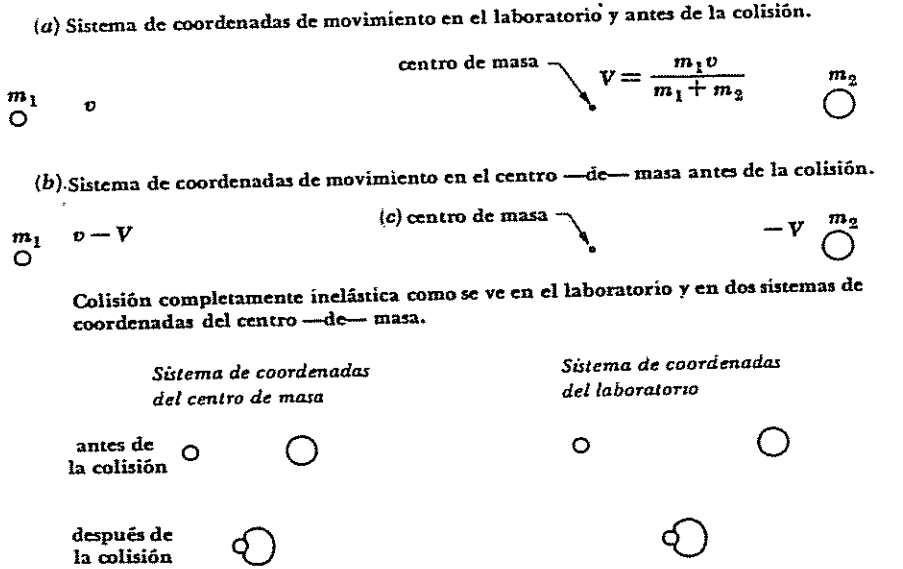


FIGURA 12-17 Sistemas de coordenadas del laboratorio y del centro de masa.

www.elsolucionario.org

captura de un neutrón de la Fig. 12-16. Este pico recibe el nombre de *resonancia*, por analogía con las resonancias acústicas ordinarias o las de circuitos de ca; es más probable que un núcleo compuesto se forme cuando la energía de excitación proporcionada concuerde exactamente con uno de sus niveles de energía, que si la energía de excitación presenta algún otro valor.

La reacción de la Fig. 12-16 tiene una resonancia en 0.176 eV, cuya anchura a la mitad del máximo es $\Gamma = 0.115$ eV. El principio de incertidumbre en la forma de $\Delta E\, \Delta t \geqslant \hbar$ nos permite relacionar la anchura del nivel Γ de un estado excitado con la vida media τ del estado. La anchura Γ evidentemente corresponde a la incertidumbre ΔE en la energía del estado, y la vida media τ corresponde a la incertidumbre Δt en el tiempo cuando el estado se desintegre, en el ejemplo presente, por emisión de rayos gamma. La vida de un estado excitado se define en general por

12.62 $$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma}$$ Tiempo de vida media del estado excitado

En el caso de la reacción anterior, la anchura del nivel 0.115 eV implica una vida media para el núcleo compuesto de

$$\tau = \frac{1.054 \times 10^{-34}\ \text{J-s}}{0.115\ \text{eV} \times 1.60 \times 10^{-19}\ \text{J/eV}}$$
$$= 5.73 \times 10^{-15}\ \text{s}$$

12.11 LA FISION NUCLEAR

Otro tipo de fenómeno de reacción nuclear que se puede analizar con la ayuda del modelo de la gota líquida es el de la *fisión*, en el que un núcleo pesado ($A > \sim 230$) se descompone en otros más ligeros. Cuando una gota líquida se excita adecuadamente, puede oscilar de varias maneras. Una de ellas se representa en la Fig. 12-18, donde la gota adopta sucesivamente la forma de esferoide alargado, esfera, esferoide achatado, esfera, esferoide alargado de nuevo, y así sucesivamente. La fuerza de recuperación de su tensión superficial hace que la gota vuelva siempre a la forma esférica, pero la inercia de las moléculas del líquido en movimiento hace que la gota vaya más allá de la forma esférica y se pase al extremo opuesto de la distorsión.

Aunque los núcleos pueden ser considerados como poseedores de tensión superficial; por tanto, al vibrar del mismo modo que una gota líquida excitada, están también sujetos a fuerzas disruptivas debidas a la repulsión electrostática de sus protones. Cuando un núcleo sufre deformación en su forma esférica, la fuerza de recuperación de corto alcance de la tensión superficial debe competir con la fuerza de repulsión de mayor alcance y con la inercia de la materia nuclear. Si el grado de deformación es pequeño, la tensión superficial es apropiada para ello, y el núcleo vibra hacia atrás y hacia adelante hasta que pierde su energía de excitación

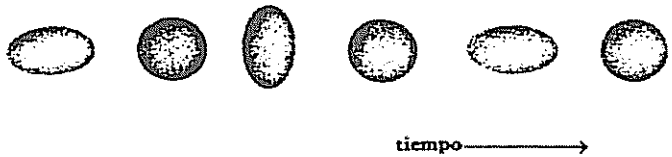


FIGURA 12-18 Oscilaciones de una gota líquida

por desintegración gamma. Si el grado de deformación es suficientemente grande, la tensión superficial no es capaz de hacer retroceder al grupo de protones que ahora se encuentran muy separados, y el núcleo se escinde en dos partes. Este cuadro de la fisión se esquematiza en la Fig. 12-19.

Los núcleos que resultan de la fisión reciben el nombre de *fragmentos de fisión*. Normalmente, estos fragmentos son de distinto tamaño y, puesto que los núcleos más pesados tienen una relación mayor neutrón/protón que los más ligeros, contienen un exceso de neutrones. Para reducir este exceso, los fragmentos emiten dos o tres neutrones tan pronto como se forman y, posteriormente, la desintegración beta lleva a las relaciones neutrón/protón a valores estables.

Un núcleo pesado sufre fisión cuando adquiere suficiente energía de excitación (5 MeV, aproximadamente) para oscilar con violencia. Ciertos núcleos, sobre todo el $^{235}_{92}U$ quedan suficientemente excitados para descomponerse en dos por la sola absorción de un neutrón. Otros, como el $^{238}_{92}U$ (compuesto de 99.3% de uranio natural y el resto de $^{235}_{92}U$), necesitan para la fisión más energía de excitación que la liberada por el enlace al ser absorbido un neutrón, de modo que sólo se produce fisión por medio de la reacción con neutrones rápidos, cuyas energías cinéticas sean superiores a 1 MeV, aproximadamente. La fisión puede ocurrir, después de la excitación, por otros medios además de la captura neutrónica; por ejemplo, por bombardeos de rayos gamma o de protones. Algunos núclidos son tan inestables que son capaces de fisión espontánea, aunque es más probable que sufran desintegración alfa antes de que esto ocurra.

El aspecto más sorprendente de la fisión nuclear es la magnitud de la energía desprendida. Esta energía se puede calcular fácilmente. Los núclidos pesados fisibles, cuyos números de masa son aproximadamente 240, tienen energías de enlace de ~7 6 MeV/nucleón, mientras que los fragmentos de fisión con números de masa de 120 tienen energías de enlace de ~8.5 MeV/nucleón. Por tanto, ¡se liberan 0.9 MeV por nucleón durante la fisión, con respecto a unos 200 MeV, para los 240 nucleones que aproximadamente toman parte! Ordinariamente, las reacciones químicas que tienen lugar en la combustión del carbón y del petróleo liberan solamente unos pocos eV cada una; otras reacciones nucleares distintas de las de fisión no dan más allá de algunos millones de ellos. La mayor parte de la energía

FIGURA 12-19 Fisión nuclear de acuerdo con el modelo de la gota líquida

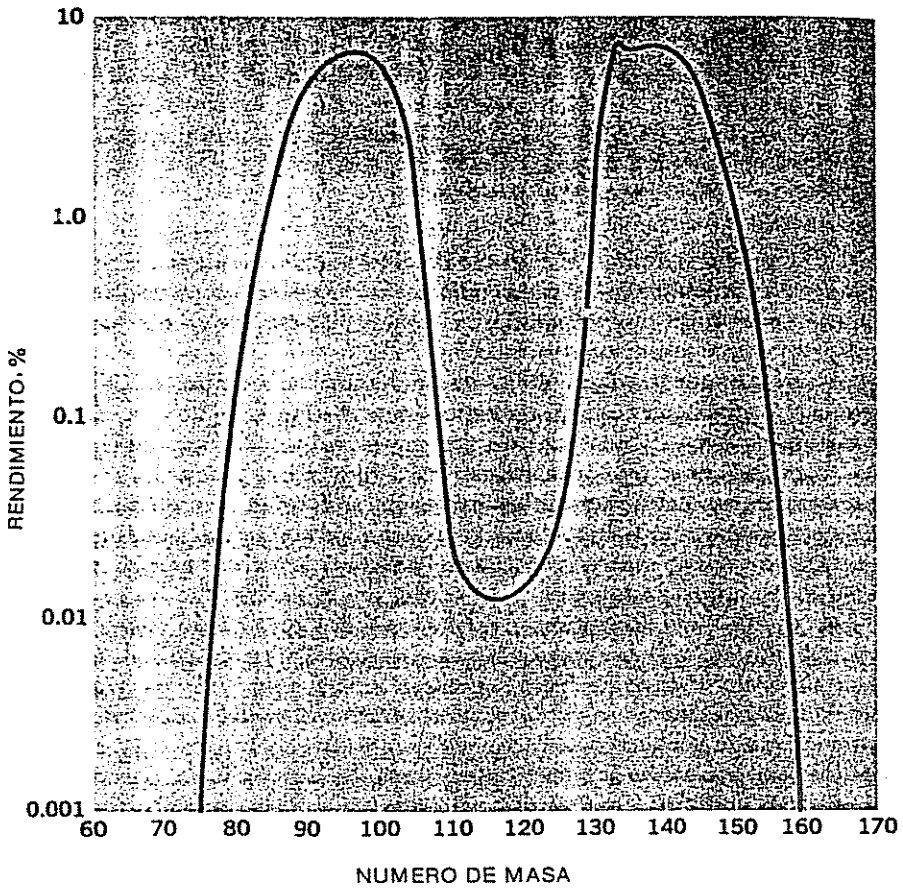


FIGURA 12-20 Distribución de los números de masa en los fragmentos resultantes de la fisión del $^{235}_{92}U$.

que se libera durante la fisión se transforma en energía cinética de los fragmentos de fisión: los neutrones, los rayos beta y gamma y los neutrinos emitidos llevan tal vez el 15% de la energía total.

Casi inmediatamente después del descubrimiento de la fisión nuclear, en 1939, se vio que, puesto que un neutrón puede inducirla con el consiguiente desarrollo de neutrones provocados por ella, es posible, en principio, pensar en una secuencia de la fisión mantenida por sí misma. La condición para que tal reacción en cadena tenga lugar en un material fisible es sencillo: al menos un neutrón de los producidos en cada fisión debe, por término medio, iniciar otra. Si hay pocos neutrones que inicien fisiones, la reacción disminuirá lentamente y se detendrá; si exactamente un neutrón de cada fisión da lugar a otra, habrá una liberación de enegía a velocidad constante (es el caso de un reactor nuclear); y si la frecuencia de

fisiones aumenta, la energía se liberará tan rápidamente que puede llegar a producirse una explosión (es el caso de una bomba atómica). A estas situaciones se les llama respectivamente *subcrítica, crítica* y *supercrítica.*

12.12 LOS ELEMENTOS TRANSURANICOS

Los elementos de número atómico superior al 92 del uranio, tienen vidas medias tan cortas que, habiéndose formado al nacer el universo, hoy en día han desaparecido. Estos *elementos transuránicos* se pueden producir en el laboratorio por medio del bombardeo con neutrones de ciertos núclidos pesados. Así, el $^{238}_{92}U$ puede absorber un neutrón y transformarse en el $^{239}_{92}U$, que sufre desintegración beta ($T_{1/2} = 23$ minutos) para dar un isótopo del elemento transurânico *neptunio* $^{239}_{93}Np$:

$$^{238}_{92}U + {}^{1}_{0}n \rightarrow {}^{239}_{92}U$$
$$^{239}_{92}U \rightarrow {}^{239}_{93}Np + e^{-}$$

Este isótopo del neptunio es también radiactivo, y sufre desintegración beta, con una vida media de 2.3 días, para dar un isótopo del elemento transuránico *plutonio:*

$$^{239}_{93}Np \rightarrow {}^{239}_{94}Pu + e^{-}$$

El plutonio mediante desintegración alfa produce el $^{235}_{92}U$ con una vida media de 24,000 años:

$$^{239}_{94}Pu \rightarrow {}^{235}_{92}U + {}^{4}_{2}He$$

Es interesante hacer notar que el $^{239}_{94}Pu$, como el $^{235}_{92}U$, es fisible y puede ser usado en reactores nucleares y para fines bélicos. El plutonio es químicamente diferente del uranio; su separación del $^{238}_{92}U$ después de la irradiación, es más fácil que la del $^{235}_{92}U$ del $^{238}_{92}U$, que es el elemento más abundante en el uranio natural.

Los elementos transuránicos posteriores del einstenio ($Z = 99$) tienen vidas medias demasiado cortas para poder ser aislados en cantidades apreciables, aunque pueden ser identificados químicamente. El elemento de número atómico más elevado descubierto hasta la fecha tiene $Z = 105$.

12.13 LA ENERGIA TERMONUCLEAR

La reacción exotérmica básica en las estrellas —y, por tanto, el origen de casi toda la energía del universo— es la fusión de núcleos de hidrógeno en núcleos de helio. Esto puede tener lugar bajo condiciones estelares en dos diferentes series de

procesos. En uno de ellos, el *ciclo protón-protón,* los choques directos de protones dan por resultado la formación de núcleos más pesados, los que, al volver a chocar, producen núcleos de helio. El otro, el *ciclo de carbono,* es una serie de etapas en las que los núcleos de carbono absorben una serie de protones hasta que al final desprenden partículas alfa para transformarse en núcleos de carbono.

La reacción inicial en el ciclo protón-protón es

$$^{1}_{1}\mathrm{H} + {}^{1}_{1}\mathrm{H} \rightarrow {}^{2}_{1}\mathrm{H} + e^{+} + \nu$$

que es la formación de deuterones por la combinación directa de dos protones, acompañada por la emisión de un positrón. Un deuterón puede unirse entonces con un protón para formar un núcleo de Helio $^{3}_{2}$He:

$$^{1}_{1}\mathrm{H} + {}^{2}_{1}\mathrm{H} \rightarrow {}^{3}_{2}\mathrm{He} + \gamma$$

Finalmente, dos núcleos $^{3}_{2}$He reaccionan para producir un núcleo $^{4}_{2}$He más dos protones

$$^{3}_{2}\mathrm{He} + {}^{3}_{2}\mathrm{He} \rightarrow {}^{4}_{2}\mathrm{He} + {}^{1}_{1}\mathrm{H} + {}^{1}_{1}\mathrm{H}$$

La energía total desprendida es $(\Delta m)c^2$, donde Δm es la diferencia entre la masa de los cuatro protones y la de una partícula alfa y dos positrones, y llega a valer 24.7 MeV. La Fig. 12-21 muestra la secuencia completa.

El proceso del ciclo del carbono es el siguiente:

$$^{1}_{1}\mathrm{H} + {}^{12}_{6}\mathrm{C} \rightarrow {}^{13}_{7}\mathrm{N}$$
$$^{13}_{7}\mathrm{N} \rightarrow {}^{13}_{6}\mathrm{C} + e^{+} + \nu$$
$$^{1}_{1}\mathrm{H} + {}^{13}_{6}\mathrm{C} \rightarrow {}^{14}_{7}\mathrm{N} + \gamma$$
$$^{1}_{1}\mathrm{H} + {}^{14}_{7}\mathrm{N} \rightarrow {}^{15}_{8}\mathrm{O} + \gamma$$
$$^{15}_{8}\mathrm{O} \rightarrow {}^{15}_{7}\mathrm{N} + e^{+} + \nu$$
$$^{1}_{1}\mathrm{H} + {}^{15}_{7}\mathrm{N} \rightarrow {}^{12}_{6}\mathrm{C} + {}^{4}_{2}\mathrm{He}$$

Ciclo del carbono

El resultado neto es la formación de una partícula alfa y dos positrones a partir de cuatro protones, con el desarrollo de 24.7 MeV; el $^{12}_{6}$C inicial actúa como una especie de catalizador del proceso, ya que al final vuelve a aparecer.

Las reacciones de fusión automantenidas sólo se pueden presentar en condiciones extremas de presión y temperatura, asegurando así que los núcleos participantes tengan la energía suficiente para poder reaccionar a pesar de la repulsión electrostática mutua, y que la frecuencia de las reacciones sea la necesaria para equilibrar las pérdidas de energía con los alrededores. En el interior de las estrellas se cumplen estas condiciones. En el Sol, cuya temperatura interior se estima en 2×10^{6} °K, el ciclo protón-protón tiene la probabilidad más alta de presentarse. En general, el ciclo del carbono es más eficiente a altas temperaturas, mientras que el de protón-protón lo es para bajas. Por tanto, las estrellas más calientes que el Sol deben su energía principalmente al primer ciclo, mientras que las más frías se lo deben en mayor parte al segundo. Los neutrinos se llevan alrededor del 10 % de la energía producida por una estrella típica.

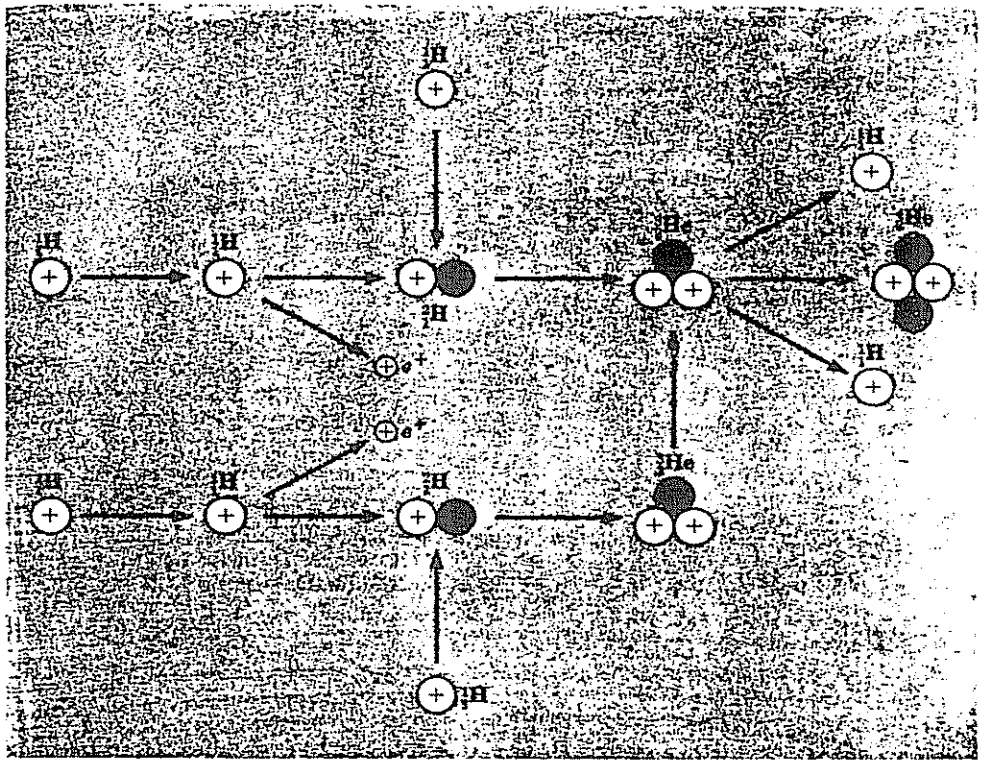


FIGURA 12-21 Ciclo protón-protón. Esta es una de las dos secuencias de reacciones nucleares que tienen lugar en el Sol y que implica la combinación de cuatro núcleos de hidrógeno para formar un núcleo de helio con la evolución de la energía.

La energía liberada en la fusión de núcleos ligeros en otros más pesados recibe el nombre de *energía, termonuclear,* en especial cuando se controla la fusión. En la Tierra, ninguno de los dos ciclos ofrecen esperanzas de aplicación, ya que sus diversas etapas exigen una gran inversión de tiempo. Las reacciones de fusión que parecen más prometedoras como origen de energía terrestre son la combinación directa de dos déuterones de una de las siguientes maneras:

$$^{2}_{1}\mathrm{H} + {}^{2}_{1}\mathrm{H} \rightarrow {}^{3}_{2}\mathrm{He} + {}^{1}_{0}n + 3.3 \text{ MeV}$$
$$^{2}_{1}\mathrm{H} + {}^{2}_{1}\mathrm{H} \rightarrow {}^{3}_{1}\mathrm{H} + {}^{1}_{1}\mathrm{H} + 4.0 \text{ MeV}$$

y la combinación directa de un deuterón y un tritón para formar una partícula alfa,

$$^{3}_{1}\mathrm{H} + {}^{2}_{1}\mathrm{H} \rightarrow {}^{4}_{2}\mathrm{He} + {}^{1}_{0}n + 17.6 \text{ MeV}$$

www.elsolucionario.org

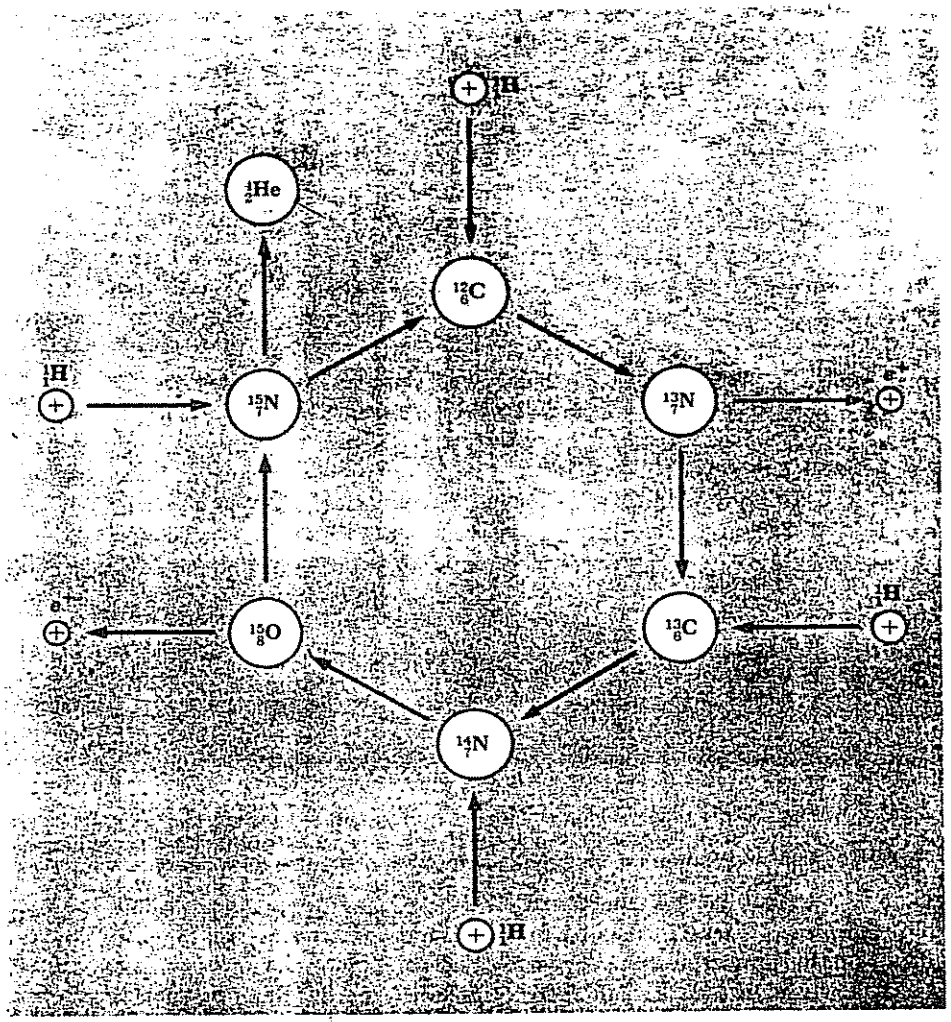


FIGURA 12-22 El ciclo del carbono también implica la combinación de cuatro núcleos de hidrógeno para formar un núcleo de helio con la evolución de energía. El núcleo de $^{12}_{6}C$ no cambia en la serie de reacciones.

Para industrializar estas reacciones se requiere deuterio barato y abundante. La mejor fuente de este isótopo son los océanos y mares, que contienen aproximadamente el 0.15% de él ¡tal vez un total de 10^{15} toneladas!. En suma, se necesita un medio más eficiente de producir las reacciones de fusión que por bombardeo con partículas rápidas obtenidas en un acelerador, ya que el funcionamiento de éste consume más energía que la que puedan producir las pocas reacciones que se dan en el blanco. Una dirección en este sentido es el empleo de gases calientes completamente ionizados dentro de un campo magnético potente. El fin

de la temperatura elevada es asegurar que los núcleos individuales de $^{2}_{1}H$ y $^{3}_{1}H$ tengan la energía suficiente para reunirse y reaccionar a pesar de la repulsión electrostática. El campo magnético se emplea como recipiente para guardar el gas reactivo de cualquier contacto con otro material que pueda enfriarlo o contaminarlo; la posibilidad de que funda la pared es pequeña, puesto que el gas, aunque tenga una temperatura de varios millones de °K, no tiene una densidad de energía elevada. Aunque los reactores de fusión presentan más dificultades prácticas que los de fisión, no cabe duda de que llegarán a ser una realidad.

Problemas

(Las masas en u de átomos neutros de los núclidos que se mencionan a continuación son: $^{1}_{1}H$, 1.007825; $^{3}_{1}H$, 3.016050 $^{3}_{2}He$, 3.016030; $^{4}_{2}He$, 4.002603: $^{7}_{3}Li$, 7.0160; $^{7}_{4}Be$, 7.0169; $^{10}_{5}B$, 10.0129; $^{12}_{5}B$. 12.0144, $^{12}_{6}C$, 12.0000, $^{13}_{6}C$, 13.0034; $^{14}_{7}N$, 14.0031; $^{16}_{8}O$, 15.9949; $^{17}_{8}O$ 16.9994. La masa del neutrón es 1.008665 u. En la tabla 7.1 se listan las masas atómicas de los elementos.)

1. El tritio ($^{3}_{1}H$) tiene una vida media de 12.5 años para la desintegración beta. ¿Qué fracción de una muestra de tritio puro permanecerá sin desintegrar después de 25 años?

2. La vida media del $^{24}_{11}Na$ es 15 horas. ¿Cuánto tardará en desintegrarse el 93.75% de una muestra de este isótopo?

3 Un gramo de radio tiene una actividad de un curie. Determínese la vida media del radio.

4. La masa de un milicurie de $^{214}_{82}Pb$ es 3×10^{-14} kg. Hallar la constante de desintegración del $^{214}_{82}Pb$. (Suponer la masa atómica en u igual al número de masa de los problemas 4, 5 y 6.)

5. La vida media del $^{238}_{92}U$ para la desintegración alfa es 4.5×10^{9} años. ¿Cuántas desintegraciones por segundo se producen en 1 gramo de $^{238}_{92}U$?

6. El isótopo del potasio $^{40}_{19}K$ sufre desintegración beta con una vida media de 1.83×10^{9} años. Hallar el número de desintegración beta por segundo que produce 1 gramo de $^{40}_{19}K$ puro.

7. Una partícula alfa de 5.78 MeV es emitida en la desintegración del radio. Si el diametro del núcleo es 2×10^{-14} m, ¿cuántas partículas alfa de longitud de onda de De Broglie se ajustan dentro del núcleo?

8. Calcular la energía máxima de los electrones emitidos en la desintegración beta del $^{12}_{5}B$.

9. ¿Por qué el $^{7}_{4}Be$ se desintegra invariablemente por captura electrónica y no por emisión positrónica?

10. La emisión positrónica se parece a la emisión electrónica en todos los aspectos, excepto en la forma de sus respectivos espectros de energía: se emiten varios electrones de baja energía, pero pocos positrones de baja energía. Así, la energía electrónica promedio en la desintegración beta es aproximadamente $0.3\ T_{máx}$, mientras que la energía positrónica promedio es aproximadamente $0.4T_{máx}$. ¿Se podría sugerir una razón sencilla que explique estas diferencias?

11. Determinar los estados fundamental y de mínima excitación del protón 39avo. en el $^{89}_{39}Y$ con ayuda de la Fig. 11-10. Con base en esta información, explicar el isomerismo del $^{89}_{39}Y$ junto con el hecho, señalado en la Sec. 6.10, de que las transiciones radiantes entre estados de momenta angulares muy diferentes son sumamente improbables.

12. Hallar la energía mínima que un neutrón debe tener en el sistema del laboratorio para iniciar la reacción

$$^{1}_{0}n + {}^{16}_{8}O + 2.20\ \text{MeV} \rightarrow {}^{13}_{6}C + {}^{4}_{2}He$$

13. Hallar la energía mínima que un protón debe tener en el sistema del laboratorio para iniciar la reacción

$$p + d + 2.22\ \text{MeV} \rightarrow p + p + n$$

14. Hallar la energía mínima que una partícula alfa debe tener en el sistema del laboratorio para iniciar la reacción

$$^{4}_{2}He + {}^{14}_{7}N + 1.18\ \text{MeV} \rightarrow {}^{17}_{8}O + {}^{1}_{1}H$$

15. Las secciones transversales en reacciones nucleares inducidas por neutrones y por protones comparables varían con la energía, aproximadamente en la forma indicada en la Fig. 12-33. ¿Por qué disminuye la sección transversal del neutrón cuando aumenta la energía, mientras que la sección transversal del protón aumenta?

16. Cuando un neutrón es absorbido por un núcleo, el núcleo compuesto resultante emite preferentemente un rayo gamma en lugar de un protón, un deuterón o una partícula alfa. ¿Por qué?

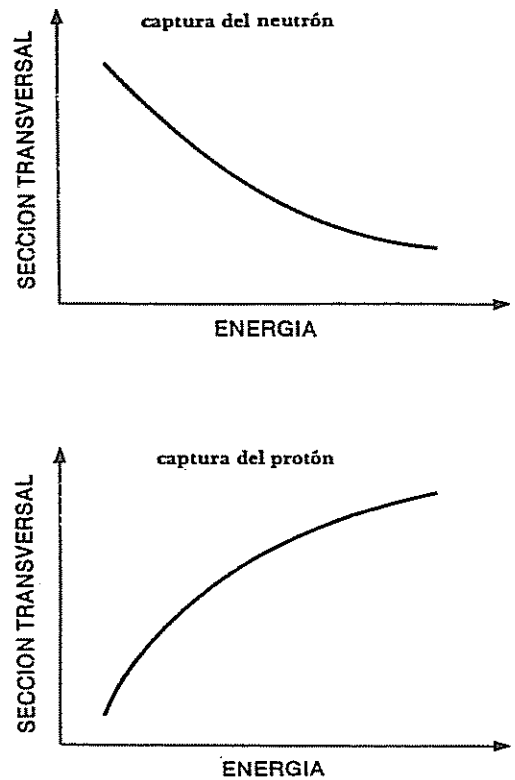


FIGURA 12-23 Las secciones transversales de captura de neutrones y protones varían de acuerdo con la energía de la partícula.

17. En el aluminio sólido hay aproximadamente 6×10^{28} átomos/m^3. Un haz de neutrones de 0.5 MeV se dirige contra una lámina de aluminio de 0.1 mm de espesor. Si la sección transversal de captura para neutrones de esta energía en el aluminio es 2×10^{-31} m^2, determinar la fracción de los neutrones incidentes que son capturados.

18. La densidad del $^{10}_{5}B$ es 2.5×10^3 kg/m^3. Su sección transversal de captura para neutrones térmicos es alrededor de 4,000 barns (los neutrones térmicos son los que están en equilibrio con la materia a temperatura ambiente). ¿Qué espesor de capa de $^{10}_{5}B$ se necesita para absorber el 99 % de un haz incidente de neutrones térmicos?

19. La densidad del hierro es 8×10^3 kg/m^3. Su sección transversal de captura es alrededor de 2.5 barns. ¿Qué fracción de neutrones de un haz incidente es absorbida por una capa de 1 cm de espesor?

20. La sección transversal del hierro para capturar neutrones es 2.5b. ¿Cuál es la trayectoria libre media de los neutrones en el hierro?

21. La fisión del $^{235}_{92}U$ libera aproximadamente 200 MeV. ¿Qué porcentaje de la masa original de $^{235}_{92}U + n$ desaparece?

22. Ciertas estrellas obtienen parte de su energía mediante la fusión de tres partículas alfa para formar un núcleo de $^{12}_{6}C$. ¿Qué energía desprende cada reacción?

LAS PARTICULAS ELEMENTALES 13

Aunque aparentemente los núcleos están compuestos solamente de protones y neutrones, se sabe que los núcleos emiten otras partículas elementales en circunstancias apropiadas. Estas partículas, llamadas "partículas extrañas" poco después de su descubrimiento, hace algo más de dos décadas, elevan a 30 el número total de las partículas elementales conocidas. Distinguir esta multiplicidad de partículas no ha sido sencillo. A pesar de que se han establecido ciertas regularidades en las propiedades de las partículas elementales y de que partículas como el electrón, el neutrino y el mesón π son relativamente bien conocidas, no se ha encontrado una teoría completa de las partículas elementales que haya tenido una amplia aceptación. Es, por tanto, apropiado terminar nuestro estudio de la física moderna con la advertencia de que queda mucho todavía por aprender acerca del mundo natural.

13.1 LAS ANTIPARTICULAS

El electrón es la única partícula elemental para la que se tiene una teoría satisfactoria. Esta teoría la desarrolló P.A.M. Dirac, en 1928, quien obtuvo una ecuación de onda para una partícula cargada en un campo electromagnético, incluyendo los resultados de la relatividad especial. Cuando la masa y la carga conocida del electrón se introducen en las soluciones apropiadas de esta ecuación, el momentum angular intrínseco del electrón resulta ser $^1/_2\,\hbar$ (esto es, spin $^1/_2$) y su momento magnético $e\hbar/2m$ (magnetón de Bohr). Estos resultados concuerdan con la experiencia, constituyendo así una prueba importante de la exactitud de la teoría de Dirac.

Un resultado inesperado de la teoría de Dirac es que predijo que podían existir electrones, tanto positivos como negativos. Al principio se pensaba que el protón

www.elsolucionario.org

era la contraparte del electrón, no obstante la diferencia de sus masas, pero en 1932 se detectó, sin lugar a dudas, un electrón positivo en el flujo de radiación cósmica en la superficie de la Tierra. Los electrones positivos, como se mencionó con anterioridad, reciben generalmente el nombre de *positrones*. La materialización de un par electrón-positrón a partir de un fotón de energía suficiente ($>$ 1.02 MeV) y la anulación de un electrón y un positrón que se encuentran se describió en la Sec. 2.6.

Comúnmente se habla del positrón como de la *antipartícula* del electrón, ya que se puede anular con un electrón. Todas las demás partículas elementales conocidas, excepto el fotón y los mesones π^0 y η^0, tienen antipartículas antagónicas: las que acabamos de mencionar constituyen sus propias antipartículas. La antipartícula de una partícula tiene la misma masa spin o vida media si es inestable, pero su carga (si la hay) es de signo opuesto y el alineamiento o antialineamiento de su spin y momento magnético también son opuestos al de la partícula.

La diferencia entre neutrino y antineutrino es particularmente interesante. El spin de un neutrino tiene sentido opuesto al de su movimiento; visto desde atrás, Fig. 13.3, el neutrino gira en sentido opuesto al de las manecillas del reloj. Por otro lado, el spin del antineutrino tiene el mismo sentido que el de su movimiento: su spin gira en el sentido del movimiento de las manecillas del reloj. Así, el neutrino se mueve en el espacio como un tornillo hacia la izquierda, mientras que el antineutrino lo hace hacia la derecha.

Hasta 1956 se supuso universalmente que los neutrinos podían estar hacia la derecha o hacia la izquierda suponiendo que no hay diferencia entre ellos (excepto el sentido del spin) y que el neutrino y el antineutrino son idénticos. Esta suposición tenía raíces que se remontaban hasta Leibnitz, contemporáneo

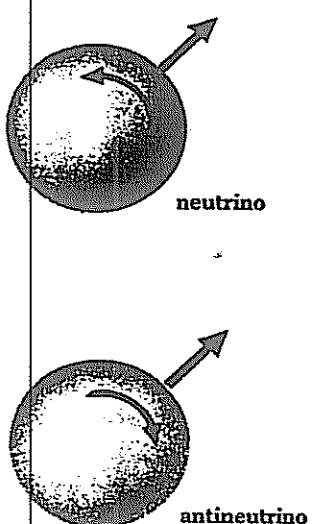


FIGURA 13-1 Neutrinos y antineutrinos tienen direcciones de spin opuestos.

de Newton e inventor del cálculo. El argumento se puede establecer como sigue: si observamos un objeto o proceso físico directamente en un espejo, no podremos distinguir cuál de los dos es el que vemos directamente y cuál el que vemos por reflexión. Por definición, las distinciones en la realidad física deben ser capaces de discernimiento o no tiene sentido. La única diferencia entre lo que se ve directamente y lo que se ve en el espejo es el cambio que hay de la derecha y la izquierda, y así *todos* los objetos y procesos se deben presentar con igual probabilidad, con la derecha y la izquierda cambiadas. Esta teoría es válida experimentalmente para interacciones nucleares y electromagnéticas, pero hasta 1856 no había sido confirmada realmente para los neutrinos. En este año, T.D. Lee y C.N. Yang sugirieron que se eliminarían diversas discrepancias teóricas si los neutrinos y antineutrinos no tuvieran un comportamiento simétrico, aun cuando ello signifique que ninguna partícula podría ser reflejada en un espejo. Los experimentos realizados después de su proposición demostraron claramente que los neutrinos y antineutrinos son discernibles, teniendo spines a derecha e izquierda respectivamente. Se puede advertir que la ausencia de simetría derecha-izquierda puede ocurrir solamente si la masa del neutrino es exactamente cero, resolviendo lo que había sido el problema experimental más difícil de la medida de dicha masa.

13.2 TEORIA DEL MESON DE LAS FUERZAS NUCLEARES

Si las fuerzas nucleares fueran exclusivamente de atracción, un núcleo sólo podría ser estable si su tamaño fuera tan pequeño (aproximadamente 2 fm de radio) que cada nucleón interactuara con todos los demás. En ese caso, la energía de enlace por nucleón sería proporcional a A, que es el número de nucleones presentes. De hecho, se encuentra que los volúmenes nucleares son proporcionales a A y la energía de enlace por nucleón es aproximadamente la misma para todos los núcleos: cada nucleón sólo interactúa con un pequeño número de sus vecinos más próximos. En consecuencia, debe haber una componente de repulsión en las fuerzas nucleares para evitar que los núcleos se aplasten, como se indica en la Fig. 11-6, lo que significa que estas fuerzas no son análogas a las fuerzas "ordinarias" de gravitación y eléctricas.

Encontramos una situación algo similar en la Sec. (8.3), donde las fuerzas presentes en el ion molecular H_2^+ se pueden considerar como portadoras de una *fuerza de intercambio* que surge debido a la posibilidad de que un electrón se traslade de un protón al otro. De acuerdo con la función de onda del sistema, sea simétrica o antisimétrica para el cambio de partículas, la fuerza de intercambio será de atracción o de repulsión. Es tentador considerar la interacción entre los nucleones como, por lo menos en parte, consecuencia de algún tipo de fuerza de intercambio. Por ejemplo, las fuerzas de intercambio proporcionan una explicación de la estabilidad del estado triplete del deuterón que se describe por una función de onda simétrica ya que los spines son paralelos, y la inestabilidad del estado singulete, que se describe por una función de onda antisimétrica. Como los

nucleones de un núcleo se encuentran todos en estados cuánticos diferentes (por el principio de exclusión) se presentarán fuerzas de intercambio tanto de atracción como de repulsión y puede ocurrir una mezcla de una fuerza nuclear de atracción "ordinaria" y las mencionadas fuerzas de intercambio de manera general para un gran número de propiedades nucleares.

La siguiente pregunta es: ¿qué clase de partículas se intercambian entre nucleones próximos? En 1932, Heisenberg sugirió que los electrones y los positrones se cambian hacia atrás y hacia adelante entre los nucleones; por ejemplo, un neutrón puede emitir un electrón y convierte en un protón, mientras que un protón que absorbe al electrón se convertirá en un neutrón. Sin embargo, cálculos basados en datos de la desintegración beta mostraron que las fuerzas resultantes del intercambio de electrones y positrones por nucleones son demasiado pequeñas según el factor de 10^{14} para que tengan cierta importancia en la estructura nuclear. Así, en 1935, el físico japonés Hideki Yukawa indicó que partículas denominadas mesones, de mayor peso que los electrones, intervienen en las fuerzas nucleares y pudo demostrar que las interacciones que se producen entre nucleones son del orden de magnitud correcto.

De acuerdo con la teoría del mesón de las fuerzas nucleares, todos los nucleones constan de núcleos idénticos rodeados por una "nube" de uno o más mesones. Los mesones pueden ser neutros o portadores de cualquier tipo de carga, y la única diferencia entre neutrones y protones se supone que reside en la composición de sus respectivas nubes de mesones. Las fuerzas que actúan entre un neutrón y otro, y entre un protón y otro, son el resultado del intercambio de mesones neutros (llamados π^0) entre ellos. La fuerza entre un neutrón y un protón es el resultado del intercambio de mesones cargados (π^+ y π^-) entre ellos. Así, un neutrón emite un mesón π^- y se convierte en un protón:

$$n \rightarrow p + \pi^-$$

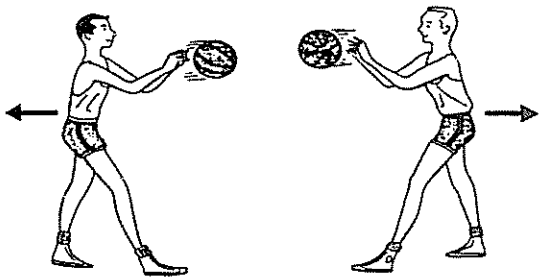
simultáneamente a la absorción del π^- por el protón, el neutrón que interactuaba con él lo convierte en un neutrón:

$$p + \pi^- \rightarrow n$$

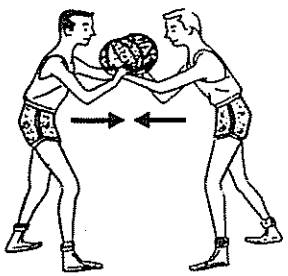
En el proceso inverso, un protón emite un mesón π^+, cuya absorción por un neutrón lo convierte en un protón:

$$p \rightarrow n + \pi^+$$
$$n + \pi^- \rightarrow p$$

Aunque no hay un procedimiento matemático simple para demostrar cómo el intercambio de partículas entre dos cuerpos puede conducir a fuerzas de atracción y de repulsión, podemos comprender intuitivamente el proceso por medio de una analogía elemental. Imaginemos que dos muchachos intercambian pelotas de baloncesto (Fig. 13-2). Si se lanzan las pelotas simultáneamente, ambos se mueven hacia atrás, y cuando atrapan las pelotas que les son lanzadas aumenta su momentum hacia atrás. Así, este método de intercambiar



fuerza de repulsión debida a intercambio de partículas



fuerza de atracción debida a intercambio de partículas

FIGURA 13-2 Del intercambio de partículas pueden surgir fuerzas de atracción y de repulsión.

pelotas produce el mismo efecto que una fuerza de repulsión entre los muchachos. Sin embargo, si los jóvenes se quitan las pelotas de las manos, el resultado será equivalente a una fuerza de atracción que actúa entre ellos.

En este punto surge un problema fundamental. Si los nucleones emiten y absorben constantemente mesones, ¿por qué nunca encontramos protones o neutrones con masas diferentes a sus masas comunes? La respuesta se fundamenta en el principio de incertidumbre. Las leyes de la física se refieren exclusivamente a cantidades mensurables experimentales, y el principio de incertidumbre limita la precisión con que se pueden hacer algunas combinaciones de mediciones. Puede ocurrir la emisión de un mesón por un nucleón que no cambia de masa —lo que es una violación palpable de la ley de conservación de la energía —con tal que el nucleón absorba un mesón emitido por el nucleón vecino con el que interactúa tan rápidamente después que *aun en principio* sea imposible determinar si ha habido o no cualquier cambio real de masa. Como el principio de incertidumbre se puede escribir,

13.1 $$\Delta E \, \Delta t \geqslant \hbar$$

un evento en el que una cantidad de energía ΔE no se conserve no está prohibido mientras la duración del evento no exceda aproximadamente $\hbar/\Delta E$.

Sabemos que las fuerzas nucleares tienen un margen máximo R de aproximadamente 1.7 fm, de manera que si consideramos que un mesón se desplaza en-

tre núcleos, aproximadamente a la velocidad de la luz c, el intervalo de tiempo Δt durante el que está viajando es

13.2 $$\Delta t = \frac{R}{c}$$

La emisión de un mesón de masa m_π representa la no conservación de energía

13.3 $$\Delta E = m_\pi c^2$$

De acuerdo con la ecuación 13.1, esto puede ocurrir si $\Delta E\, \Delta t \geqslant \hbar$; es decir, si

$$(m_\pi c^2)\left(\frac{R}{c}\right) \geqslant \hbar$$

Así, la masa mínima del mesón se especifica mediante

13.4 $$m_\pi \geqslant \frac{\hbar}{Rc}$$
$$\geqslant 1.9 \times 10^{-28}\ \text{kg}$$

que es aproximadamente 200 m_e, esto es, 200 masas de electrones.

13.3 PIONES Y MUONES

Doce años después de ser formulada la teoría del mesón se hallaron realmente partículas con las propiedades predichas fuera del núcleo. Actualmente se llama *piones* a los mesones π.

Dos factores contribuyeron al descubrimiento tardío de los piones libres. Primero, se debe suministrar a un nucleón suficiente energía para que la emisión de un pión conserve energía. Por tanto, se requiere por lo menos una energía de $m_\pi c^2$, aproximadamente 140 MeV. Para que en un choque se trasmita esta cantidad de energía a un nucleón estacionario, la partícula incidente debe tener considerablemente más energía que $m_\pi c^2$ para que se conserven tanto el momentum como la energía. Se requieren así partículas con energía cinética de varios centenares de MeV para producir piones libres, y estas partículas se encuentran en la naturaleza solamente en la marea difusa de radiación cósmica que bombardea a la Tierra. Así, el descubrimiento del pión tuvo que esperar el desarrollo de métodos de investigación de las interacciones de rayos cósmicos suficientemente precisos y sensibles. Recientemente se pusieron en funcionamiento aceleradores de alta energía; éstos imprimen a las partículas las energías necesarias, y la cantidad de piones que se crearon con su ayuda se pudieron estudiar rápidamente.

La segunda razón del retraso entre la predicción teórica y el descubrimiento experimental del pión es su inestabilidad: la vida media de un pión cargado es solamente 1.8×10^{-8} s y la del pión neutro es 7×10^{-17} s. La vida media del mesón π^0 es tan corta que su existencia se estableció hasta 1950.

Los piones cargados se desintegran casi invariablemente en mesones más ligeros llamados *mesones* μ (o muones) y neutrinos:

$$\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu$$
$$\pi^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu$$

Estos neutrinos no son los mismos que los de la desintegración beta, por lo que sus símbolos son ν_μ y $\bar{\nu}_\mu$. La existencia de dos clases de neutrinos se confirmó en 1962. Para ello se bombardeó un metal con protones de alta energía, creándose así gran cantidad de piones. Las reacciones inversas para los neutrinos a partir de la desintegración de estos piones produjo solamente muones y no electrones. Por tanto, estos neutrinos deben ser de algún tipo diferente a los asociados con la desintegración beta.

El pión neutro se desintegra en un par de rayos gamma:

$$\pi^0 \rightarrow \gamma + \gamma$$

Los piones π^+ y π^- tienen masas en reposo de 273 m_e, mientras que la del pión es ligeramente menor, 264 m_e. El π^- es la antipartícula del π^+, y el π^0 es su propia antipartícula, distinción que comparte solamente con el fotón y el mesón η^0.

Aunque la existencia de piones se predijo fácilmente muchos años antes de su descubrimiento, los muones, por el contrario, actualmente todavía son un enigma. Sus propiedades físicas se conocen con toda seguridad. Los muones positivos y negativos tienen la misma masa en reposo, 207 m_e, y el mismo spin, $\frac{1}{2}$. Los dos se desintegran con una vida media de 1.5×10^{-6} seg, en electrones y pares neutrino-antineutrino:

$$\mu^+ \rightarrow e^+ + \nu_e + \bar{\nu}_\mu$$
$$\mu^- \rightarrow e^- + \nu_\mu + \bar{\nu}_e$$

Como en el caso de los electrones, el estado de carga positiva de los muones representa la antipartícula. El muón neutro no existe.

Al contrario que los piones que, como es de esperar, interactúan fuertemente con los núcleos, los muones lo hacen sólo electrostáticamente. En consecuencia, los muones penetran fácilmente considerables cantidades de materia antes de ser absorbidos. La mayoría de las partículas de radiación cósmica a nivel del mar son muones que proceden de la desintegración de los piones creados en los choques nucleares de los núcleos atómicos primarios de la radiación cósmica, ya que casi todas las otras partículas de la radiación se desintegran o pierden energía rápidamente, de modo que son absorbidas en la superficie de la Tierra.

El aspecto misterioso del muón es su función —o, mejor aún, la carencia aparente de toda función. Unicamente en la masa y en la estabilidad difiere el muón del electrón. Esto conduce a la hipótesis de que el muón es meramente un tipo de "electrón pesado" en lugar de un ente distinto. Otra prueba que se estu-

www.elsolucionario.org

diará más adelante en este capítulo es menos halagadora para el muón, aunque no esté todavía claro por qué, por ejemplo, los piones se desintegran preferentemente en muones en lugar de hacerlo directamente en electrones; únicamente alrededor de un 0.01 por 100 de los muones se desintegran directamente en electrones y neutrinos.

13.4 KAONES E HIPERONES

Los piones y muones no acaban la lista de las partículas conocidas con masas intermedias entre la del electrón y la del protón. Se ha descubierto una tercera clase de mesones, los *mesones K*; sus miembros, todos inestables, pueden desintegrarse de diversas formas. Los mesones K o kaones con carga tienen una masa en reposo de $966m_e$, spin 0 y vida media de 8×10^{-9} s. El siguiente esquema muestra las distintas desintegraciones posibles para los kaones, en orden de probabilidad relativa:

$$\begin{aligned} K^+ &\rightarrow \mu^+ + \nu_\mu \\ &\rightarrow \pi^+ + \pi^0 \\ &\rightarrow \pi^+ + \pi^+ + \pi^- \\ &\rightarrow \pi^0 + e^+ + \nu_e \\ &\rightarrow \pi^0 + \mu^+ + \nu_\mu \\ &\rightarrow \pi^+ + \pi^0 + \pi^0 \end{aligned}$$

Aparentemente, hay dos variedades distintas de mesones K neutros: el K_1^0 y el K_2^0. Los dos tienen una masa en reposo de $974\,m_e$, spin 0; el primero, una vida media de 7×10^{-11} s y el segundo de 4×10^{-8} s. Para los mesones neutros se conocen las siguientes formas de desintegración; también en orden de probabilidad relativa:

$$\begin{aligned} K_1^0 &\rightarrow \pi^+ + \pi^- \\ &\rightarrow \pi^0 + \pi^0 \\ K_2^0 &\rightarrow \pi^- + e^+ + \nu_e \\ &\rightarrow \pi^+ + e^- + \overline{\nu}_e \\ &\rightarrow \pi^- + \mu^+ + \nu_\mu \\ &\rightarrow \pi^+ + \mu^- + \overline{\nu}_\mu \\ &\rightarrow \pi^0 + \pi^0 + \pi^0 \\ &\rightarrow \pi^+ + \pi^- + \pi^0 \end{aligned}$$

Además de la interacción electromagnética con la materia a través de la cual pasan, los mesones K muestran diversos grados de interacción específicamente nuclear. Los mesones K^+ y K^0 interactúan sólo débilmente con los núcleos, mientras que su antipartícula es fácilmente dispersada y absorbida por núcleos en su recorrido.

Las partículas elementales más pesadas que los protones se llaman *hiperones*. Los hiperones conocidos son de cuatro tipos: hiperones Λ, Σ, Ξ y Ω, citados en orden creciente de masa. (Λ, Σ, Ξ y Ω son las letras griegas mayúsculas *lambda, sigma, xi* y *omega* respectivamente.) Todos son inestables y tienen una vida media extremadamente pequeña. El spin de todos los hiperones es $\frac{1}{2}$, excepto el del hiperón Ω, que es $\frac{3}{2}$.

Las masas, vidas medias y esquemas de desintegración de diversos hiperones se presentan en la Tabla 13-1.

Al igual que los piones y los kaones (pero a diferencia de los muones) los hiperones exhiben definidas interacciones con los núcleos. Los hiperones Λ^0 son capaces de actuar como un constituyente nuclear. Un núcleo que contiene un hiperón Λ^0 ligado se conoce como un *hiperfragmento;* los hiperones Λ^0 se desintegran eventualmente y el nucleón y el mesón π resultante reaccionan bien con el núcleo padre o emergen de él.

13.5 SISTEMATICA DE LAS PARTICULAS ELEMENTALES

A pesar de la multiplicidad de partículas elementales y de la diversidad de sus propiedades, es posible distinguir un orden en su comportamiento. Este orden no constituye una teoría de las partículas elementales, así como en los espectros atómicos el orden no constituye una teoría del átomo, pero hace concebir la esperanza de que realmente haya una descripción teórica única que pueda englobar los fenómenos de las partículas elementales, al igual que la teoría cuántica lo hace con los fenómenos atómicos. Hasta ahora, no ha aparecido esta descripción, aunque se han propuesto algunos caminos atractivos para abordar el fenómeno. En lo que queda de este capítulo, se examinarán las regularidades observadas en las partículas elementales y su significación aparente.

La Tabla 13-2 es una lista ordenada de acuerdo con las masas en reposo de las partículas elementales relativamente estables que hasta ahora hemos citado, más el mesón η, que describiremos brevemente. Por relativamente estables se entiende que las vidas medias de las partículas exceden, con mucho, el tiempo requerido para que la luz atraviese una distancia igual al "diámetro" de una partícula elemental. Este diámetro es probablemente un poco superior a 10^{-15} m, y el tiem-

Tabla 13.1
PROPIEDADES DEL HIPERON

Partícula	Masa, m_e	Vida media, s	Desintegración
Λ^0	2,184	1.7×10^{-10}	$\Lambda^0 \rightarrow p + \pi^-$
			$\rightarrow n + \pi^0$
Σ^+	2,328	0.6×10^{-10}	$\Sigma^+ \rightarrow p + \pi^0$
			$\rightarrow n + \pi^+$
Σ^-	2,342	1.1×10^{-10}	$\Sigma^- \rightarrow n + \pi^-$
Σ^0	2,334	$<10^{-14}$	$\Sigma^0 \rightarrow \Lambda + \gamma$
Ξ^-	2,585	1.2×10^{-10}	$\Xi^- \rightarrow \Lambda + \pi^-$
Ξ^0	2,573	2.0×10^{-10}	$\Xi^0 \rightarrow \Lambda + \pi^0$
Ω^-	3,276	$\sim 10^{-10}$	$\Omega^- \rightarrow \Lambda + K^-$
			$\rightarrow \Xi^0 + \pi^-$

Tabla 13.2

Partículas elementales relativamente estables contra la desintegración por la fuerte interacción nuclear.

Clase	Nombre	Partícula +e	Partícula 0	Partícula −e	Antipartícula +e	Antipartícula 0	Antipartícula −e	Spin	Masa en reposo m_0	Masa en reposo MeV	Vida media s	L	M	B	S	Y	I
												(Las antipartículas tienen signos opuestos)					
FOTON	fotón		γ			(γ)		1	0	0	estable	0	0	0			
LEPTON	e-neutrino		ν_e			$\bar{\nu}_e$		½	0	0	estable	+1	0	0			
	μ-neutrino		ν_μ			$\bar{\nu}_\mu$		½	0	0	estable	0	+1	0			
	electrón			e^-	e^+			½	1	0.51	estable	+1	0	0			
	μ mesón			μ^-	μ^+			½	207	106	1.5×10^{-6}	0	+1	0			
MESON	π mesón	π^+	π^0	π^-		(π^0)		0	264	135	7×10^{-17}	0	0	0	0	0	1
									273	140	1.8×10^{-8}						
	K mesón	K^+	K^0	K^-		$\bar{K}^0$		0	966	494	8×10^{-9}	0	0	0	+1	+1	½
									974	498	7×10^{-11}; 4×10^{-8}						
	η mesón		η^0			(η^0)		0	1,073	548	$\sim 10^{-18}$	0	0	0	0	0	0
BARION	nucleón protón	p				$\bar{p}$		½	1,836	938	estable	0	0	+1	0	+1	½
	nucleón neutrón		n			$\bar{n}$		½	1,839	940	6.5×10^2						
	Λ hiperón		Λ^0			$\overline{\Lambda^0}$		½	2,184	1,116	1.7×10^{-10}	0	0	+1	−1	0	0
	Σ hiperón	Σ^+				$\overline{\Sigma^-}$			2,328	1,102	0.6×10^{-10}						
			Σ^0			$\overline{\Sigma^0}$		½	2,334	1,104	$<10^{-12}$	0	0	+1	−1	0	1
				Σ^-	$\overline{\Sigma^+}$				2,342	1,197	1.1×10^{-10}						
	Ξ hiperón		Ξ^0			$\overline{\Xi^0}$		½	2,571	1,310	2.0×10^{-10}	0	0	+1	−2	−1	½
				Ξ^-	$\overline{\Xi^+}$				2,585	1,321	1.2×10^{-10}						
	Ω hiperón			Ω^-			$\overline{\Omega^+}$	3/2	3,276	1,674	$\sim 10^{-10}$	0	0	+1	−3	−2	0

po característico requerido para atravesarlo a la velocidad de la luz es, por consiguiente, del orden de magnitud de 10^{-23} s.

Así, casi todas las partículas de la Tabla 13.2 son capaces de viajar a través del espacio como entes distintos a través de caminos de longitud mensurable en dispositivos tales como las cámaras de burbujas.

Gran número de experimentos ponen de manifiesto también la existencia de muchas otras "partículas", cuya vida frente a la desintegración es solamente de unos 10^{-23} s. ¿Qué quiere decir que una partícula tenga un intervalo tan breve de existencia? y, en realidad, ¿cómo se puede aun medir un tiempo de 10^{-23} s? Tales partículas no se pueden detectar observando su formación, sino que se manifiestan como estados resonantes en la interacción de partículas más estables (y, por tanto, más fácilmente observables). Los estados resonantes se encuentran en los átomos como niveles de energía; en el Cap. 4 revisamos el experimento de Franck Hertz, que muestra la existencia de niveles atómicos de energía a través de la dispersión de electrones inelásticos para ciertas energías solamente. Un átomo, cuando está en un estado de excitación específico, no es el mismo que cuando está en su estado fundamental o en otro estado excitado, pero normalmente no hablamos de tal átomo excitado como si fuera un miembro de una clase especial de átomos. Esto es debido a que la interacción que lo eleva a un estado excitado —la interacción electromagnética— es bien conocida. Existe una situación algo diferente en el caso de las partículas elementales, de las que sabemos solo de una manera parcial las diversas interacciones implicadas, excepto la interacción electromagnética, y gran parte de nuestra información procede de las propiedades de las resonancias.

Veamos lo que está implicado en una resonancia en el caso de las partículas elementales. Se lleva a cabo un experimento, por ejemplo, el bombardeo de protones mediante mesones energéticos π^+, y se estudia cierta reacción, por ejemplo,

$$\pi^+ + p \rightarrow \pi^+ + p + \pi^+ + \pi^- + \pi^0$$

El efecto de la interacción del mesón π^+ y el protón es la creación de tres nuevos piones. En cada reacción de este tipo, los nuevos mesones tienen cierta energía total que consta de sus energías en reposo más sus energías cinéticas correspondientes a sus centros de gravedad. Si dibujamos el número de sucesos observados frente a la energía total de los nuevos mesones en cada suceso, obtenemos una gráfica como la de la Fig. 13-3. Evidentemente, existe una marcada tendencia a que la energía total de los mesones sea de 785 MeV y otra tendencia algo más débil a que sea de 548 MeV. Podemos decir que la reacción muestra resonancia a 548 y 785 MeV o, de manera semejante, que esta reacción transcurre a través de la creación de una partícula intermedia que puede ser una de masa de 548 MeV u otra cuya masa sea de 785 MeV. Con la gráfica podemos, incluso, estimar la vida media de estas partículas intermedias, que se conocen con los nombres de mesones η y mesones ω, respectivamente. De acuerdo con el principio de incertidumbre, la incertidumbre del tiempo de desintegración de una partícula inestable —desig-

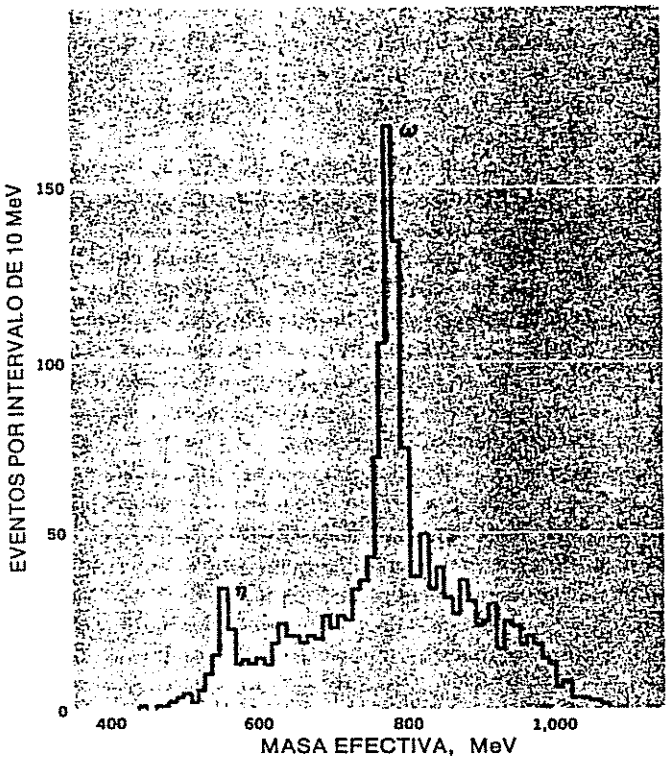


FIGURA 13-3 Los estados resonantes en la reacción $\pi^+ + p \rightarrow \pi^+ + p + \pi^+ + \pi^- + \pi^0$ se verifican para masas efectivas de 548 y 785 MeV. Masa efectiva significa energía total incluyendo la energía de masa de los tres nuevos mesones con respecto a su centro de gravedad.

nando por τ a su vida media —da lugar a una incertidumbre en la determinación de su energía— que es la anchura ΔE a la mitad del máximo del pico correspondiente en la Fig. 13-3, cuya relación es

13.5 $$\tau \Delta E \approx \hbar$$

Por tanto, se pueden establecer la vida de las resonancias o, lo que es lo mismo, la vida de los mesones η y ω. La vida de la partícula η es suficientemente grande para considerarla como una partícula relativamente estable y está incluida en la Tabla 13-2, mientras que la vida de ω es demasiado pequeña. En este capítulo volveremos a tratar de las partículas de resonancia.

Las partículas de la Tabla 13.2 parecen estar naturalmente comprendidas en cuatro categorías generales. Una de estas categorías la acapara el fotón, partícula estable cuya masa en reposo es cero y cuyo spin es la unidad. Si existiera el *gravitón*, partícula que sería el cuanto del campo gravitatorio, de igual forma que el fotón es el cuanto del campo electromagnético o el pión es el cuanto del

campo de fuerzas nucleares, estaría también en esta categoría. El gravitón, todavía sin detectar, no tendría masa, sería estable y tendría un spin de 2. Su interacción con la materia sería extremadamente débil y es improbable que las técnicas actuales sean capaces de comprobar su existencia. (La masa cero del gravitón se puede deducir del ilimitado alcance de las fuerzas gravitatorias. Como hemos visto en la Sec. 13.2, las fuerzas mutuas entre dos cuerpos se pueden considerar como transmitidas por un intercambio de partículas entre ellos. Si queremos preservar la conservación de la energía, el principio de incertidumbre requiere que el alcance de la fuerza sea inversamente proporcional a la masa de las partículas de intercambio, por eso las fuerzas gravitatorias pueden tener un alcance infinito solamente si la masa del gravitón es cero. Un argumento similar vale también para la masa del fotón.)

Despues del fotón, aparecen en la Tabla 13-2 el neutrino e y el neutrino μ- el electrón y el muón, todos con spines de $\frac{1}{2}$. Todas estas partículas reciben el nombre de *leptones*. A los mesones π, K y η todos ellos con spines de 0, se les clasifica como *mesones*. (A pesar de su nombre, el mesón μ tiene más en común con los leptones que con los mesones π, K y η.) Las partículas más pesadas, principalmente nucleones e hiperones comprenden los *bariones*. Si bien este agrupamiento resulta razonable basándose solo en la masa y el spin, existe otra prueba a su favor. Induzcamos tres nuevos números cuánticos, L, M y B de la manera siguiente. Asignemos el número $L = 1$ al electrón y al neutrino e, y $L = -1$ a sus antipartículas; las restantes partículas tienen $L = 0$. Asignemos el número $M = 1$ al mesón μ y a su neutrino, y $M = -1$ a sus antipartículas; todas las demás partículas tienen $M = 0$. Finalmente, asignemos $B = 1$ a todos los bariones, y $B = -1$ a los antibariones; las demás partículas quedan con $B = 0$. Estos números indican que en cualquier proceso en el que participen partículas elementales, los valores totales de L, M y B permanecen constantes. Las leyes clásicas de conservación de la energía, momentum, momento angular y carga eléctrica, más las nuevas leyes de conservación de L, M y B son las que establecen si un determinado proceso puede o no ocurrir. Un ejemplo lo constituye el neutrón.

$$n^0 \rightarrow p^+ + e^- + \bar{\nu}_e$$

Como $L = 0$ para el neutrón y el protón, $L = 1$ para el electrón y $L = -1$ para el antineutrino, el valor total de L antes y después de la desintegración es 0. De una manera similar $B = 1$ para el neutrón y el protón, de forma que el valor total de B antes y después de la desintegración es 1. La estabilidad del protón es una consecuencia de la conservación de la energía y el número bariónico: no hay bariones de masa inferior a la del protón y por eso el protón no sufre desintegración.

13.6 EL NUMERO DE EXTRAÑEZA

A pesar de la introducción de los números cuánticos L, M, B, ciertos aspectos del comportamiento de las partículas elementales necesitan explicación. Por ejem-

www.elsolucionario.org

plo, era difícil ver por qué ciertas partículas pesadas se desintegran en otras más ligeras con emisión de rayos gamma, mientras que otras no sufren una desintegración permisible aparentemente igual. Así, el barión Σ^0 se desintegra en un barión Λ^0 y un rayo gamma,

$$\Sigma^0 \rightarrow \Lambda^0 + \gamma$$

mientras que nunca se observa que el barión Σ^+ se desintegre en un protón y un rayo gamma

$$\Sigma^+ \not\rightarrow p^+ + \gamma$$

Otra peculiaridad está basada en la observación general de que los procesos físicos en la naturaleza tienen lugar tanto más rápidamente cuanto mayor es la liberación de energía. Sin embargo, muchas partículas extrañas, cuya desintegración libera considerable energía, tienen vidas medias grandes, del orden de mil millones de veces mayor que las calculadas teóricamente. Otro tercer aspecto sorprendente es que las partículas extrañas no se crean nunca solas, sino dos o tres al mismo tiempo. Estas y otras consideraciones condujeron a la introducción del *número de extrañeza S*. La Tabla 13.2 muestra los valores de S que se asignan a las distintas partículas elementales. Notemos que L, B y S son cero para el fotón y los mesones π^0 y η^0. Como estas partículas no tienen carga, no hay manera de distinguirlas de sus antipartículas. Por esta razón, el fotón y los mesones π^0 y η^0 se consideran como sus propias antipartículas. Antes de estudiar la interpretación del número de extrañeza, examinaremos las diversas clases de interacción de partículas.

Aparentemente hay cuatro tipos de interacción entre las partículas elementales que, en principio, comprenden todos los procesos físicos del universo. El más débil de estos es la interacción gravitacional. Le sigue la llamada interacción débil, que se presenta entre leptones y otros leptones, mesones o bariones, además de cualquier fuerza electromagnética que pueda existir. La interacción débil es responsable de la desintegración de partículas en las que intervienen neutrinos, en especial la desintegración beta. Más fuertes que estas dos interacciones son las interacciones electromagnéticas entre todas las partículas cargadas y las que tienen momento eléctrico o magnético. Finalmente, las más fuertes de todas son las fuerzas nucleares (normalmente se dice fuerzas o interacciones fuertes cuando se trata de partículas elementales) que se encuentran entre mesones, bariones, y mesones y bariones.

Las intensidades relativas de las interacciones electromagnética, fuerte, débil y gravitacional están en las relaciones $1 : 10^{-2} : 10^{-14} : 10^{-40}$. Las distancias a través de las que actúan las fuerzas correspondientes son, por supuesto, muy diferentes. Mientras la interacción fuerte entre nucleones próximos es de 10 elevado a una potencia mayor que la fuerza gravitacional entre ellos, cuando están separados uno de otro un metro, la proporción es distinta. La estructura del núcleo está determinada por las propiedades de la interacción fuerte, mientras que la estructura del átomo lo está por la interacción electromagnética. La materia en conjunto es eléctricamente neutra, y las interacciones fuertes y débiles están muy limitadas en su alcance. Por tanto, la interacción gravitacional, insignificante por completo a pequeña escala, es la dominante a gran escala. El papel de la interacción débil en la estructura de la materia es aparentemente el de una pequeña perturbación que se encarga de que el núcleo con una relación inadecuada neutrón/protón sufra una desintegración beta de corrección.

Volvamos ahora al número de extrañeza S. Se ha encontrado que, en todos los procesos que implican interacción fuerte y electromagnética, el número de extrañeza se conserva. La desintegración

$$\begin{array}{rccc} & \Sigma^0 & \rightarrow \Lambda^0 & + \gamma \\ S = & -1 & -1 & 0 \end{array}$$

conserva S y se ha observado su existencia, mientras que la desintegración superficialmente similar

$$\begin{array}{rccc} & \Sigma^+ & \not\rightarrow p^+ & + \gamma \\ S = & -1 & 0 & 0 \end{array}$$

no conserva S y nunca se ha observado. Las partículas extrañas surgen de choques nucleares de alta energía que suponen interacciones fuertes, y su apariencia múltiple proviene de la necesidad de conservar S. La relativa lentitud con que todas las partículas elementales inestables salvan la desintegración del mesón π^0 y del mesón η^0 se explica si suponemos que las interacciones débiles son también características de los mesones y bariones, así como de los leptones, aunque normalmente estén dominadas por interacciones fuertes o electromagnéticas. En procesos fuertes o electromagnéticos es imposible de explicar, excepto en los casos señalados, debido a la falta de conservación de S; solamente se dispone de la interacción débil en procesos en que varía el valor total de S. Los casos gobernados por interacciones débiles tienen lugar lentamente, de acuerdo con la experiencia. Así y todo, la interacción débil es incapaz de permitir que S varíe en una desintegración en más de $\pm$ 1. Por tanto, los hiperones Ξ^- no se desintegran directamente en un neutrón.

$$\begin{array}{rccc} & \Xi^- & \not\rightarrow n^0 & + \pi^- \\ S = & -2 & 0 & 0 \end{array}$$

sino en las dos etapas,

$$\begin{array}{rccc} & \Xi^- & \rightarrow \Lambda^0 & + \pi^- \\ S = & -2 & -1 & 0 \end{array}$$

$$\begin{array}{rccc} & \Lambda^0 & \rightarrow n^0 & + \pi^0 \\ S = & -1 & 0 & 0 \end{array}$$

Se ha comprobado que una cantidad Y llamada *hipercarga* es de gran utilidad para caracterizar familias de partículas; se conserva en las interacciones fuertes.

La hipercarga es igual a la suma de los números de extrañeza y bariónico de las familias de partículas.

13.6 $$Y = S + B$$

Para los mesones, la hipergarga es igual al número de extrañeza. Los diversos valores de hipercarga asignados vienen tabulados en la Tabla 13.2.

13.7 EL SPIN ISOTOPICO

A la vista de la tabla 13.2 se aprecia la existencia de familias de partículas, donde cada uno de los miembros tienen esencialmente la misma masa e iguales propiedades de interacción, pero difieren en la carga. Estas familias se llaman *multipletes,* y es natural considerar los miembros de un multiplete como prototipos de diferentes estados de carga que presenta y se representa por un número I, de manera que la multiplicidad del estado viene dada por $2I+1$. Así, al multiplete del nucleón se le asigna $I = \frac{1}{2}$, y sus $2 \cdot \frac{1}{2} + 1 = 2$ estados son el neutrón y el protón. El multiplete del mesón π tiene $I = 1$, y sus $2 \cdot 1 + 1 = 3$ estados son los mesones π^+, π^- y π^0. El mesón η tiene $I = 0$, por lo que posee un solo estado ya que $2 \cdot 0 + 1 = 1$. Existe aquí evidentemente una analogía con el desdoblamiento de un estado momento angular con número cuántico l en $2l + 1$ subestados, y esto ha conducido a que I reciba el nombre, algo confuso, de *número cuántico de spin isotópico.*

Continuando la analogía con el momento angular, el spin isotópico puede estar representado por un vector **I** en "el espacio de spin isotópico", cuya componente en una cierta dirección está controlada por un número cuántico comúnmente designado por I_3. Los valores posibles de I_3 quedan limitados a $I, I-1, \ldots, 0, \ldots, -(I-1), -I$, de forma que I_3 es un semientero si I es semientero y es entero o 0 si I es entero. El spin isotópico del nucleón es $I = \frac{1}{2}$ lo que quiere decir que I_3 puede ser $\frac{1}{2}$ o $-\frac{1}{2}$ el primero representa al protón y el último al neutrón. En el caso del mesón π, $I=1$ e $I_3 = 1$ corresponde al mesón π^+, $I_3 = 0$ al mesón π^0 e $I_3 = -1$ al mesón π^-. Los valores de I_3 de los demás mesones y bariones se asignan de igual forma.

La carga de un mesón o barión está relacionada con su número bariónico B, su número de extrañeza S y la componente I_3 de su spin isotópico mediante la fórmula

13.7 $$q = e\left(I_3 + \frac{B}{2} + \frac{S}{2}\right)$$

Cada orientación permitida del vector de spin isotópico **I** queda directamente relacionada con la carga de la partícula así representada. En el caso del multiplete del nucleón, el protón tiene $I_3 = \frac{1}{2}$, $B = 1$, y $S = 0$, de donde $q = e$, mientras que el neutrón tiene $I_3 = -\frac{1}{2}$, $B = 1$, y $S = 0$, y así $q = 0$. Si se trata del multiplete del mesón, $B = S = 0$ y los 3 valores de I_3, 1, 0 y -1 dan respectivamente valores de $q = e$, 0, y $-e$. La carga y el número bariónico B se conservan en todas las interacciones. Por eso, cuando S se conserve, I_3 debe conservarse también, particularmente en las interacciones fuerte y electromagnética. Solamente en las interacciones débiles cambia el I_3 total.

Una ley de conservación suplementaria es sugerida por la observada independencia de carga de las fuerzas nucleares, que resulta de las interacciones fuertes. Propiedades del núcleo, tales como su energía de enlace y esquema de niveles de energía, cambian cuando se sustituye un neutrón por un protón o viceversa, en cantidades que provienen de consideraciones puramente electromagnéticas, lo que implica que las propias interacciones fuertes no dependan de la carga eléctrica. Pero la diferencia entre un protón y un neutrón en el espacio de spin isotópico depende solo de la orientación de sus vectores de spin isotópico, de manera que podemos decir que la independencia de la carga en las interacciones fuertes significa que esta interacción es independiente de la orientación en el espacio de spin isotópico. De modo análogo, el momentum angular es independiente de la orientación en el espacio real y esto se conserva en todas las interacciones, lo que nos lleva a suponer que el spin isotópico se conserva en las interacciones fuertes. Esta suposición resulta correcta y de aquí se deduce que el número cuántico de spin isotópico I se conserva en las interacciones fuertes, pero no en las débiles ni en las electromagnéticas.

Volveremos a considerar la relación entre los principios de conservación y la invariancia con respecto a las operaciones simétricas en la próxima sección.

Nótese que aunque I_3 se conserva en las interacciones electromagnéticas, I no tiene por qué conservarse. Un ejemplo de un proceso en el que I varía mientras I_3 no lo hace es la desintegración del mesón π^0 en dos fotones:

$$\pi^0 \rightarrow \gamma + \gamma$$

Un mesón π^0 tiene $I = 1$ e $I_3 = 0$, mientras que I no está definido para los fotones no existe componente I_3 de spin isotópico en ambos miembros de la ecuación, lo que concuerda con su conservación aunque I haya variado.

13.8 SIMETRIAS Y PRINCIPIOS DE CONSERVACION

En la sección anterior, la independencia de la carga en las interacciones fuertes se expresó mediante la isotropía del espacio de spin isotópico. Por analogía con el momento angular, se dijo que esta simetría suponía la conservación del spin isotópico en las interacciones fuertes. Es un hecho notable que todas las simetrías conocidas en el mundo físico conducen directamente a las leyes de conservación, de forma que la relación entre simetría de giro de **I** y conservación de **I** es absolutamente plausible. Revisemos algunas de estas relaciones de simetría - conservación antes de continuar nuestro estudio sobre las partículas elementales.

¿Qué se entiende por una simetría? Formalmente, aunque vagamente, podemos decir que existe una simetría de una determinada clase cuando cierta operación deja algo sin cambiar. Una vela es simétrica con respecto a un eje vertical porque puede girar alrededor de dicho eje sin que cambie su aspecto o su forma; también es simétrica con respecto a su imagen en un espejo. La tabla 3.3 recoge las operaciones de simetría principales que dejan sin cambiar las leyes físicas bajo alguna o todas las circunstancias. La operación de simetría más sencilla es la traslación en el espacio, en la que las leyes físicas no dependen del punto escogido por origen de nuestro sistema de coordenadas. Mediante métodos más avanzados que los empleados en este libro, es posible demostrar que la invariancia al verificarse las traslaciones en el espacio trae como consecuencia la conservación del moméntum lineal. Otra operación sencilla de simetría es la translación en el tiempo en la que las leyes físicas no dependen de la selección $t = 0$, y esta invariancia tiene como consecuencia la conservación de la energía. La invariancia, bajo rotaciones en el espacio, lo que significa que las leyes físicas no dependen de la orientación de sistema de coordenadas en el que vienen expresadas, trae como consecuencia la conservación del moméntum angular.

La conservación de la carga eléctrica está relacionada con las transformaciones de medida, que son desplazamientos en los ceros de los potenciales electromagnéticos escalar y vectorial V y A. (Como expresa la teoría electromagnética, el campo electromagnético puede ponerse en función de los potenciales V y A en lugar de E y B, cuyos valores están relacionados mediante las fórmulas del cálculo vectorial $\mathbf{E} = -\nabla V$ y $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$). Las transformaciones de medida no afectan a E y B puesto que se obtienen derivando los potenciales, y esta invariancia conduce a la conservación de la carga.

Tabla 13.3

Algunas operaciones de simetría y sus principios de conservación asociados.

Operación de simetría	Cantidad conservada
Todas las interacciones dependen de:	
Translación en el espacio	Moméntum lineal, p
Translación el tiempo	Energía E
Rotación en el espacio	Moméntum angular L
Transformación electromagnética	Carga eléctrica q
Intercambio de partículas idénticas	Tipo de comportamiento estadístico
Inversión de espacio, tiempo y carga	Producto de paridad de carga paridad de espacio y paridad de tiempo CPT
?	Número bariónico B
?	Número leptónico L
?	Número leptónico M
Las interacciones fuertes y electromagnéticas son solo independientes de:	
Inversión de espacio	Paridad P
Reflexión de carga	Paridad de carga C, componente de spin isotópico I_3 y extrañeza S
La interacción fuerte es solo independiente de:	
Carga	Spin isotópico I

El intercambio de partículas idénticas en un sistema es un tipo de operación de simetría que conduce a la conservación del carácter de función de onda de un sistema. La función de onda puede ser simétrica bajo el intercambio, en cuyo caso las partículas no obedecen el principio de exclusión y el sistema sigue la estadística de Bose-Einstein, o bien, puede ser antisimétrico, en cuyo caso las partículas obedecerán el principio de exclusión y el sistema seguirá la estadística de Fermi-Dirac. La conservación de estadísticas (o, lo que es lo mismo, de simetría o antisimetría de función de onda) significa que ningún proceso que tenga lugar dentro de un sistema aislado puede cambiar el comportamiento estadístico del sistema. Un sistema que presente un comportamiento estadístico de Bose - Einstein no se puede alterar por sí mismo para presentar un comportamiento estadístico de Fermi-Dirac o viceversa. Este principio de conservación tiene aplicación en física nuclear, donde encontramos que los núcleos que contienen un número impar de nucleones (número impar de masa A) obedecen a la estadística de Fermi-Dirac, mientras que aquéllas que tienen A par siguen la estadística de Bose-Einstein; por esto, la conservación de estadísticas es otra condición que tienen que cumplir una reacción nuclear.

La conservación del número bariónico B y número leptónicos L y M son los únicos entre los principios fundamentales de conservación que tienen simetrías desconocidas asociadas con ellos.

Aparte de la independencia de la carga en las interacciones fuertes y su conservación asociada del spin isotópico que ya hemos mencionado, las restantes operaciones de simetría de la Tabla 3.3 comprenden *paridades* de una u otra clase. El término paridad, sin ningún calificativo, se refiere al comportamiento de una función de onda ante una inversión en espacio. Por inversión en espacio se designa la reflexión de coordenadas espaciales a través del origen, cambiando $-x$ por x, $-y$ por y y $-z$ por z. Si el signo de la función de onda ψ no cambia bajo la inversión

$$\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z)$$

se dice que ψ es par. Si el signo de ψ cambia

$$\psi(x, y, z) = -\psi(-x, -y, -z)$$

se dice que ψ es impar. Así, la función cos x es una función par puesto que $\cos x = \cos(-x)$, mientras sen x es una función impar porque $\operatorname{sen} x = -\operatorname{sen}(-x)$.

Si escribimos

$$\psi(x, y, z) = P\psi(-x, -y, -x)$$

podemos considerar P como un número cuántico que caracteriza a ψ y cuyos posibles valores son $+1$ (par) y -1 (impar). Cada partícula elemental lleva cierta

www.elsolucionario.org

paridad asociada con ella, y la paridad de un sistema tal como un átomo o un núcleo es el producto de la paridad de la función de onda que describe las coordenadas de sus partículas constituyentes y las paridades intrínsecas de las partículas mismas. Puesto que $|\psi|^2$ es independiente de P, la paridad de un sistema no es una cantidad que tenga consecuencias físicas claras.

Sin embargo, se encuentra que la paridad inicial de un sistema aislado no cambia con cualquier acontecimiento que ocurra dentro de él, lo que se puede reconocer comparando las paridades de los estados finales conocidos de una reacción o transformación con las paridades de los estados finales igualmente plausibles, pero que no se ha visto que ocurran. Un sistema de paridad par conserva paridad par y un sistema de paridad impar conserva paridad impar; este principio se conoce como conservación de la paridad.

La conservación de la paridad es una expresión de la simetría de inversión del espacio, esto es, la no dependencia de las leyes físicas respecto del sistema de coordenadas a derechas o a izquierdas que se emplee para describir los fenómenos. En la Sec. 13.1 se vio que el neutrino tenía un spin hacia la izquierda y el antineutrino un spin hacia la derecha, de manera que existe una profunda diferencia entre la imagen especular de cualquier partícula y la propia partícula. Esta asimetría implica que las interacciones en las que participan neutrinos y antineutrinos—interacciones débiles—no necesitan conservar la paridad, y verdaderamente la conservación de la paridad sólo ocurre en las interacciones fuertes y en las electromagnéticas. Desde el punto de vista histórico, el hecho de que la inversión espacial no sea invariablemente una operación de simetría lo sugirió el fallo de la conservación de la paridad en la desintegración del mesón K^+, y se confirmó más tarde mediante los experimentos que mostraron la paridad de mano de ν y $\bar{\nu}$.

Hay otras dos paridades en la Tabla 13.3, la paridad de tiempo T y la paridad de carga C, que describen respectivamente el comportamiento de una función de onda cuando t se cambia por $-t$ y cuando q se cambia por $-q$. Esta operación de simetría que corresponde a la conservación de la paridad de tiempo es la *inversión de tiempo*. La simetría de inversión del tiempo implica que la dirección de crecimiento del tiempo no es significativa, de manera que el inverso de cualquier proceso que puede ocurrir es también un proceso que puede ocurrir. Con otras palabras, si es valedera la simetría con la inversión del tiempo, es posible establecer mediante una imágen cinematográfica de un suceso, si éste ocurre hacia adelante o hacia atrás. Aunque se consideró hace tiempo que la paridad de tiempo T debe conservarse en toda interacción, se descubrió en 1964 que el mesón K_2^0 se puede desintegrar en un mesón π^+ y en otro π^-, lo que viola la conservación de T. La simetría de los fenómenos con respecto a la inversión del tiempo presenta una situación ambigua en la actualidad. La operación de simetría que corresponde a la conservación de la paridad de carga C es la *conjugación de carga* que consiste en cambiar cada partícula de un sistema por su antipartícula. La paridad de la carga C, igual que la paridad del espacio P, no se conserva en las interacciones débiles. Sin embargo, a pesar de la validez limitada de la conservación de C, P y T, existen fundadas razones teóricas para creer que el producto CPT de las paridades de carga, espacio y tiempo de un sistema se conserva invariable. La conservación de CPT significa que para cada proceso existe una imagen especular antimateria, copia invertida de la anterior, y esta simetría particular parece mantenerse ante sus simetrías componentes que algunas veces faltan.

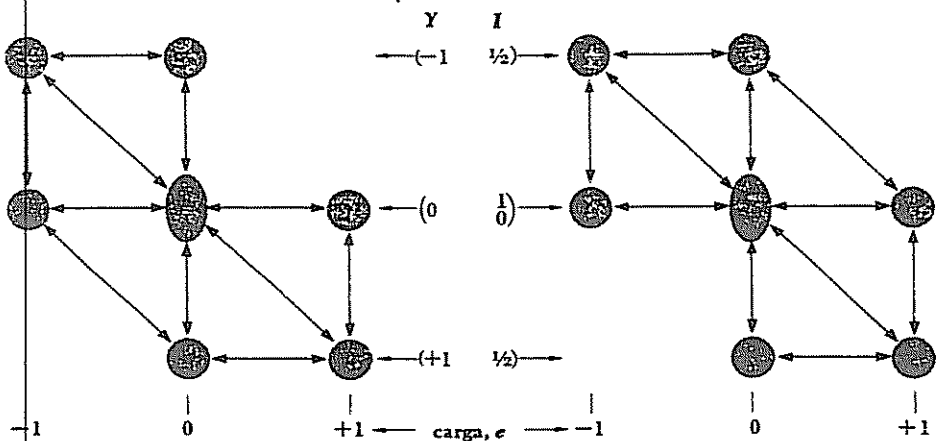
13.9 TEORIAS DE PARTICULAS ELEMENTALES

Además de las partículas que aparecen en la tabla 13.2 hay, como ya se mencionó, muchas partículas de vida extremadamente breve cuya existencia viene revelada por resonancias en interacciones en que se ven envueltas sus partículas hermanas de vida más larga. Esos estados de resonancia están caracterizados por definidos valores de masa, carga, momentum angular, spin isotópico, paridad, extrañeza y así sucesivamente, y no es más lógico rechazarlos como partículas legítimas sólo porque su existencia sea tan transitoria como lo es al considerar el neutrón simplemente como un estado inestable del protón. Naturalmente, es posible suponer como cierto lo último y generalizar así que todas las partículas elementales son en realidad estados excitados de unas pocas partículas elementales verdaderas aún no identificadas; esto constituye una línea de ataque hacia una teoría sobre las partículas elementales. Por otra parte, si aceptamos como legítimas las partículas de la Tabla 13.2, resulta consecuente incluir también los estados de resonancia y buscar una estructura teórica que comprenda el conjunto de más de un centenar de entidades.

Una propuesta reciente trata de explicar las diferentes partículas elementales en términos de otro tipo de partícula llamada el *quark*. Se han postulado tres variedades de quark, más sus antipartículas, y se supone que todas las partículas elementales son combinaciones de quarks y antiquarks. Lo realmente revolucionario acerca de los quarks es que dos de ellos tendrán cargas de $-\frac{1}{3}e$ y el tercero tendrá una carga de $+\frac{2}{3}e$. Según esta teoría, cada barión se compone de tres quarks, cada mesón se compone de pares quark-antiquark. A pesar de los muchos esfuerzos, no se ha encontrado alguna prueba experimental que sustente la existencia de quarks, pero las ideas subyacentes a su predicción son tan persuasivas que la búsqueda continúa.

Se han ideado varios esquemas de clasificación, interesantes y sugestivos para las partículas con interacciones fuertes, basados en la abstracta teoría de grupos. Uno de estos esquemas, el llamado de *camino óctuple*, recopila los multipletes de spin isotópico como supermultipletes cuyos miembros tienen el mismo spin y paridad, pero difieren en la carga e hipercarga (Figs. 13-4 y 13-5). El esquema prescribe el número de miembros que debe tener cada supermultiplete particular y también relaciona las diferencias de masa entre estos miembros. El gran éxito del camino óctuple consistió en predecir una partícula desconocida, el hiperión Ω^- que posteriormente se buscó y por fin se descubrió en 1964. Otras

FIGURA 13-4 Supermultipletes de bariones de spin ½ y mesones de spin 0, estables frente a la desintegración nuclear fuerte. Las flechas indican transformaciones posibles de acuerdo con el camino óctuple.



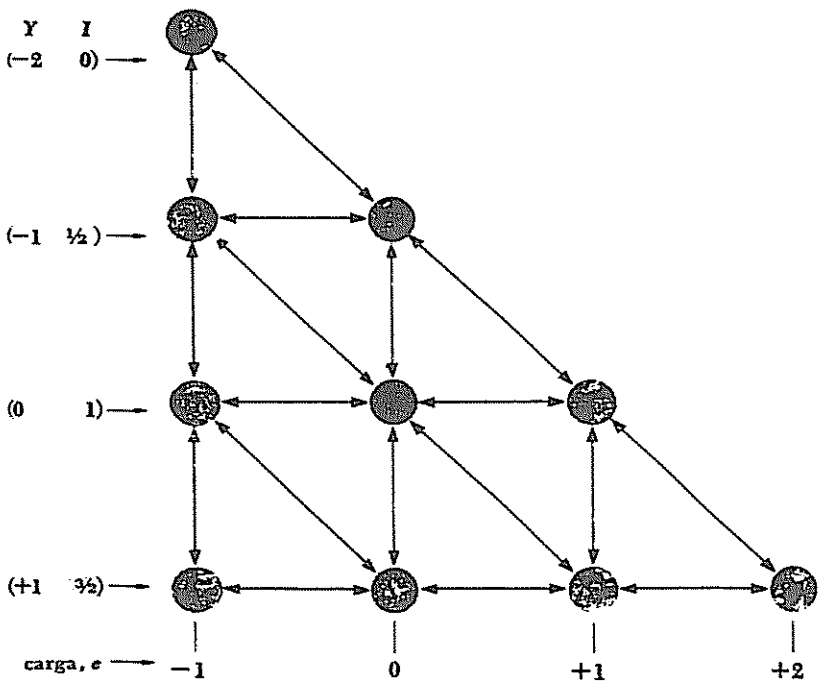


FIGURA 13-5 Supermultiplete de barión cuyos miembros tienen spin ½ y (excepto) son particulas resonantes de corta vida; las particulas Ξ y Σ son más pesadas y tienen spines diferentes de los de la Tabla 13.2. La particula Ω⁻ se predijo a partir de este esquema.

tentativas han relacionado los supermultipletes del camino óctuple uno a uno y han intentado incorporar consideraciones relativistas a su interpretación.

El éxito conseguido por el camino óctuple al organizar nuestro conocimiento de las partículas de interacción fuerte implica que la simetría de su estructura matemática tiene su equivalente en una simetría en la naturaleza. Cuanto más profundizamos en la naturaleza, tantas más sugerencias obtenemos del orden que hay por debajo de las complicaciones y confusiones del conocimiento experimental. Pero a pesar de la elegancia de las simetrías que se han expuesto, aún queda el problema de las propias interacciones fundamentales, lo que significa, como se relacionan unas con otras y las propiedades de las partículas a través de las que se manifiestan.

Problemas

1. *a*) Hallar la energía cinética máxima del electrón emitido en la desintegración beta del neutrón libre. b) ¿Cuál es la energía mínima de enlace que debe aportar un neutrón a un núcleo para que el neutrón no se desintegre? Comparar esta energía con las energías de enlace por nucleón observadas en núcleos estables.

2. Las fuerzas de van der Waals están limitadas a márgenes muy cortos y no presentan dependencia del cuadrado inverso de la distancia, así nadie sugiere que el intercambio de una partícula especial similar al mesón es responsable de dichas fuerzas. ¿Por qué?

3. ¿Qué energía tienen cada uno de los rayos gamma producidos cuando se desintegra un mesón π^0 ? ¿Deben ser iguales las energías?

4. ¿Cuánta energía debe tener un fotón de rayos gamma si se tiene que materializar en un par neutrón-antineutrón? Demostrar que este tipo de eventos no puede ocurrir en ausencia de otro cuerpo sin violar la conservación de la energía o la conservación del momentum lineal.

5. ¿Por qué un neutrón libre no se desintegra en un electrón y un positrón? ¿En un par protón-antiprotón?

6. Un mesón π^0 , cuya energía cinética es igual a su energía en reposo, se desintegra en su trayectoria. Hallar el ángulo entre los dos fotones de rayos gamma que se producen.

7. Un protón de energía cinética T_0 choca con un protón estacionario y se produce un par protón-antiprotón. Si el momentum del protón de bombardeo se

reparte por igual entre las cuatro partículas resultantes del choque, encontrar el valor mínimo de T_0.

8. Trazar la desintegración de la partícula Ξ^0 en partículas estables.

9. Un mesón μ^- choca con un protón y se crea un neutrón y otra partícula. ¿Cuál es esta partícula?

10. Una teoría de la evolución del universo postula que la materia se crea espontáneamente en el espacio libre. Si esta materia se encontrara en la forma de pares neutrón-antineutrón, ¿qué leyes de la conservación se violarían?

11. ¿Cuáles de las siguientes reacciones pueden ocurrir? Establecer qué leyes de conservación son violadas por las demás.

(*a*) $p + p \rightarrow n + p + \pi^+$
(*b*) $p + p \rightarrow p + \Lambda^0 + \Sigma^+$
(*c*) $e^+ + e^- \rightarrow \mu^+ + \pi^-$
(*d*) $\Lambda^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^-$
(*e*) $\pi^- + p \rightarrow n + \pi^0$

12. El mesón π^0 no tiene ni carga ni momento magnético lo que hace difícil comprender el hecho de que se desintegre en un par de cuantos electromagnéticos. Uno de los caminos para explicar este proceso es considerar que el π^0 se convierte primero en un par nucleón-antinucleón "virtual", cuyos miembros interactúan así electromagnéticamente para producir dos fotones, cuyas energías suman la energía de masa del π^0. ¿Durante cuánto tiempo el principio de incertidumbre permite que exista el par nucleón-antinucleón virtual? ¿Es lo suficientemente grande para que el proceso pueda ser observado?

13. La interacción de un fotón con otro se puede comprender considerando que cada fotón puede temporalmente convertirse en un par "virtual" electrón-positrón en el espacio libre; por tanto, los pares respectivos pueden interactuar electromagnéticamente. *a*) ¿Durante cuánto tiempo el principio de incertidumbre permite que exista un par virtual electrón-positrón si $h\nu \ll 2m_0c^2$, donde m_0 es la masa en reposo del electrón? *b*) Si $h\nu > 2m_0c^2$, ¿se podrá utilizar la noción de pares virtuales electrón-positrón para explicar el papel de un núcleo en la producción de un par real, aparte de su función de asegurar la conservación de la energía y el momentum?

RESPUESTAS A LOS PROBLEMAS IMPARES

Capitulo 1

1. 213 m
3. 2.6×10^8 m/s
5. 6 ft; 2.6 ft
7. 4.2×10^7 m/s
9. $0.5c$; $0.988c$; $0.9c$; $0.988c$
11. 4.2×10^7 m/s
13. 1.87×10^8 m/s; 1.64×10^8 m/s
15. 8.9×10^{-28} kg
17. 0.294 MeV
19. 2.7×10^{11} kg
21. 4.4×10^9 kg
23. $F = \dfrac{m_0\,(dv/dt)}{(1 - v^2/c^2)^{3/2}}$
25. Los resultados son diferentes porque todos los observadores encuentran el mismo valor para la velocidad de la luz, mientras que la velocidad del sonido, medida por un observador, depende del movimiento de éste en relación con el medio en que se propagan las ondas del sonido.
27. (*a*) 6, 10; (*b*) 10, 6, sí

Capitulo 2

1. 1,800 Å
3. 5,400 Å; 3.9 eV
5. 2.83×10^{-19} J
7. 1.71×10^{30} fotones/s
9. (*a*) 6.82×10^{-10} lb/in.^{2}
   (*b*) 4.24×10^{21} fotones/m^2-s
   (*c*) 3.9×10^{28} watts; 1.2×10^{38} fotones/s
   (*d*) 1.41×10^{13} fotones/m^3
11. 1.24×10^5 V
13. 3.14 Å
15. 5×10^{18} Hz
17. 0.015 Å
19. 2.4×10^{19} Hz
21. 0.565 Å
23. (*a*) 2×10^{-3} eV
    (*b*) 2×10^{-25} eV
    (*c*) 3.5×10^{18} Hz; 7.7×10^3 Hz

Capitulo 3

1. 6.86×10^{-12} m
3. 1.24 GeV; 616 MeV
5. $\lambda = 12.27\left[V\left(\dfrac{eV}{2m_0c^2} + 1\right)\right]^{-1/2}$
9. $u = w/2$
11. 6.2%
13. 1.16×10^5 m/s; 63 m/s
15. 1.05×10^{-23} kg-m/s; 1.16×10^7 m
(¡7,200 mil) el paquete de ondas estrecho originalmente se ha dispersado en 1 s, formando un paquete mucho más amplio porque las velocidades de fase de las ondas que intervienen varían con k y en el paquete original se encontraban una amplia gama de números de onda.
17. Cada átomo de un sólido está limitado a una cierta región de espacio definida—de lo contrario, el conjunto de átomos no sería sólido. Por lo tanto, la incertidumbre en la posición de cada átomo es finita y su momentum y, en consecuencia, su energía no pueden ser cero. No existe restricción alguna para

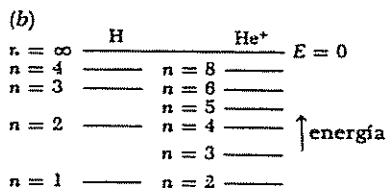
www.elsolucionario.org

la posición de una molécula en un gas ideal, por lo cual la incertidumbre de su posición es efectivamente infinita, y su momentum y, en consecuencia, su energía sí pueden ser cero.

Capítulo 4

1. 10°
3. 0.876
7. 1.14×10^{-13} m
9. $m/m_0 = 1.002$
11. $f = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{Qe}{4\pi\varepsilon_0 mR^3}}$. Para el átomo de hidrógeno, $f = 6.6 \times 10^{15}$ s^{-1}, que es comparable a las frecuencias más altas en el espectro del hidrógeno
13. 920 Å
15. 12 V
17. 8.2×10^6 rev
19. 1.05×10^5 K
21. 2.4 Å
23. 1.04 MeV
25. (*a*) $E_n = -\frac{m'Z^2e^4}{8\varepsilon_0{}^2h^2}\left(\frac{1}{n^2}\right)$

(*b*)



(*c*) 2.28×10^{-8} m

Capítulo 5

3. 2.1 MeV
5. 2.07×10^{-15} eV
7. Clásicamente $\overline{T} = \overline{V} = E/2$, donde T y V son promedios sobre un periodo de oscilación completo.
11. *b*, *d*, *f*.

Capítulo 6

5. $r = (3 \pm \sqrt{5})a_0$
7. 68%; 25%
9. *p*, 29%; *d*, 18%; *f*, 13%

Capítulo 7

1. 182
3. Los metales alcalinos son los mayores en cada periodo de la tabla periódica pues su estructura atómica consta de un solo electrón afuera de las capas interiores cerradas que protegen al electrón de todas las cargas nucleares, a excepción de + *e* entonces, hay un decremento regular en tamaño en cada periodo, a medida que aumenta la carga nuclear, la cual atrae a los electrones exteriores a la proximidad del núcleo. Al final de cada periodo hay un pequeño incremento de tamaño por la repulsión mutua de los electrones exteriores.
5. 1.39×10^{-4} eV
7. 0.0283 Å
9.

estado	S	L	J
$^1S_0$	0	0	0
$^3P_2$	1	1	2
$^2D_{3/2}$	½	2	3/2
$^5F_5$	2	3	5
$^6H_{5/2}$	5/2	5	5/2

11. no hay otros estados permitidos
13. $^2P_{1/2}$
15. $5\mu_B$, 3
17. 18.5 T
19. cobalto (Z = 27); molibdeno (Z = 42)

Capítulo 8

1. 3.5×10^4 K
3. F_2^+; F_2^-
5. C^{13}
7. 1.27 Å
9. 2.23 Å
11. No.
13. 1.24×10^{14} Hz

Capítulo 9

3. $2/\sqrt{\pi}\, v_p$
5. 1.6×10^9 neutrones/m^3
7. (*a*) 1.00:1.68:0.89:0.22:0.027
   (*b*) sí; 1533 K
9. $1.00{:}2.3 \times 10^{-10}{:}6.2 \times 10^{-12}{:}2.3 \times 10^{-12}$
11. 5800 K
13. Un gas de fermiones ejercerá la mayor presión, porque la distribución de fermi tiene una mayor proporción de partículas de alta energía que las otras distribuciones; un gas de bosones ejercerá la mayor presión, porque la distribución de bose tiene una mayor proporción de partículas de baja energía que las otras.
15. 18.70 eV; 16.84 eV. Se requieren los átomos de He para mantener una población de energía invertida en los átomos de Ne, mediante la transferencia de energía hacia ellos en colisiones, lo cual complementa la excitación directa de los átomos de Ne por impacto de electrones.

Capítulo 10

1. (a) Las fuerzas de van der Waals incrementan la energía cohesiva pues son atractivas. (v) Las oscilaciones del punto 0 decrecen la energía cohesiva pues representan una forma de posesión de energía presente en un sólido, pero no en átomos o iones individuales.
3. La pérdida de calor por el gas en expansión es igual al trabajo efectuado contra las fuerzas atractivas de van der Waals entre sus moléculas.
5. (a) En un metal, los electrones de valencia pueden encontrar estados de energía excitados desocupados en la banda de conexión para cualquier energía de excitación por pequeña que sea.

(b) El salto de energía en los semiconductores es pequeño ($\leqslant$ 1.5 eV), por lo tanto, los fotones de la luz visible pueden excitar a los electrones de valencia hacia la banda de conducción aunque los fotones de la luz infrarroja no tienen energía suficiente para este propósito.

(c) El salto de energía es tan grande que los fotones de la luz visible no pueden proporcionar la energía de excitación suficiente para que los electrones de la banda de valencia alcancen la banda de conducción.

7. tipo $-p$
9. kT es una fracción muy pequeña de ε_F, y por lo tanto la distribución de energía del electrón no es muy sensible a la temperatura.
11. 1.9 eV; 7.6×10^{-10} m
13. 7.29 eV; $n = 8.4$
17. 3.3 eV; 2.56×10^4 K; 1.08×10^6 m/s
19. 11 eV
21. 2
23. 50 Å; la energía de ionización del electrón es 0.009eV, la cual es mucho más pequeña que el salto de energía y no está muy lejos del valor 0.025 eV para kT a 20° C.
25. Por que $m^*/m = 1.01$ en el cobre

Capítulo 11

1. 8.83 cm
3. 19 Por ciento B^{10}, 81 por ciento B^{11}
5. 34.97 u
7. 7.98 MeV
9. 15.6 MeV
11. Las fuerzas nucleares no pueden ser fuertemente dependientes de la carga.
13. La energía cinética del nucleón que corresponde a la incertidumbre del momentum que queda implicada por una incertidumbre en la posición de 2 fm es 5.2 MeV, la cual es consistente en un pozo potencial de 35 MeV de profundidad.
15. $u_F = \frac{(3/\pi)^{4/3}h^2}{32mR_0{}^2}$; 34 MeV

Capítulo 12

1. 1/4
3. 1,620 años
5. 1.23×10^4 s^{-1}
7. 3.37
9. La masa de $^7_4$Be no es lo bastante mayor que la de $^7_3$Li para permitir la creación de un positrón.
11. Sugerencia: el 39 ésimo protón del $^{89}_{39}$Y suele estar en estado $p_{1/2}$ y el si-

guiente estado más alto que se ofrece a este protón es el $g_{9/2}$

13. 3.33 MeV

15. La sección transversal del neutrón disminuye al aumentar la energía porque la posibilidad de que un neutrón sea capturado depende del tiempo que transcurra en un núcleo en particular, y este periodo es inversamente proporcional a la velocidad del neutrón. La sección transversal del protón es menor con baja energía por la fuerza repulsiva que ejerce la carga nuclear positiva, la cual proporciona una barrera de potencial que el protón debe atravesar.

17. 1.2×10^{-6}

19. 0.21

21. 0.1%

Capítulo 13

1. 0.78 MeV; 1.29 MeV, muy por debajo de las energías de enlace observadas por nucleón de núcleos estables.

3. 68 MeV; sí, a fin de que el momentum se conserve.

5. Esta desintegración no conserva ni el número de Barianos ni el spín; esta desintegración no conserva ni el número de Barianos; ni el spín ni energía.

7. 5,630 MeV

9. Un neutrino.

11. Pueden presentarse (*a*) y (*e*); (*b*) viola la conservación de B y del spín; *e* viola la conservación de L M y el spín; (d) viola la conservación de B y el spín.

13. 6.4×10^{-22} s; el fuerte campo eléctrico de núcleo separa al electrón y al protón lo suficiente para que no puedan recombinarse después para volver a formar el fotón.

INDICE

Acoplamiento jj del momento angular:
  atómico, 230
  nuclear, 388
Acoplamiento *LS* angular:
  atómico, 277, 233
  nuclear, 388
Acoplamiento spín-órbita:
  en átomos, 209
  en núcleos, 388
Actividad del radioisótopo, 393, 396
Afinidad electrónica, 322
Agujero en el cristal, 338
Angular, momento, (*ver* Momento angular)
Antineutrino, 436, 441
Antipartícula, 436
Atomo:
  complejos, estructura del, 214
  masa del, 365
  modelo clásico del, 116
  modelo de Bohr (*ver* Modelo atómico de Bohr).
  modelo de Rutherford, 115
  modelo de Thomson, 115
  modelo vectorial del, 224
  momento angular del, 184, 224
  niveles de energía del, 127, 133, 220
Atomo de hidrógeno:
  funciones de onda del, 178, 183
  modelo clásico del, 115
  modelo de Bohr, 122
  niveles de energía del, 127, 182, 232
  números cuánticos del, 178, 180
  órbitas del electrón en, 123
  probabilidad de densidad del electrón en el, 193
  radio de Bohr, 127
  teoría cuántica del, 175, 192
  y principio de incertidumbre, 94
Aumento de la masa relativista, 30, 33

Banda de energía en un cristal, 336, 350, 354
Banda prohibida en el cristal, 339, 350
Barn, el, 418
Baryon, 447
Blindaje, electrón, en el átomo, 220, 321
Bohr, Niels, 103
Boson, 214
Bremsstrahlung, 52

Calor específico del hidrógeno, 287
Camino óctuple, 456
Campo electromagnético, fluctuaciones en el vacío del, 202, 231
Capa:
  cerrada, 213
  electrón atómico, 219
Capas del electrón y subcapas en el átomo, 213, 219
Captura del electrón por núcleos, 414
Ciclo protón-protón de las reacciones nucleares, 428
Colisiones, elásticas e inelásticas, 133
Compuestos del carbón:
  orbitales híbridos en, 263, 267
  saturadas e insaturadas, 269
Compuestos insaturados de carbono, 269
Compuestos saturados de carbono, 270
Conductor sólido, naturaleza del, 354
Conductores aislantes, naturaleza de, 357
Configuración electrónica de elementos, 221
Conjugación de carga, 455
Constante de desintegración del radioisótopo, 394
Constante de madelung, 326
Constante de Planck, 48
Constante de Rydberg, 123, 131
  efecto del movimiento nuclear sobre la, 134
Contracción de la longitud, relativista, 17, 26
Contracción de Lorentz-Fitzgerald, 17
Coordenadas esféricas, 176
Coordinación numérica de un cristal, 324
Corrimiento de Lamb en el espectro de hidrógeno, 232
Corrimiento gravitacional al rojo, 68, 70
Cristal:
  covalente, 328
  hielo, 331
  iónico, 320
  metálico, 333
  molecular, 330
  van der Waals, 331
Cristal cúbico de caras centradas, 324
Cristal de cloruro de sodio, 246
Cristal de van der Waals, 331
Cristal iónico, 321
Cuantización del momento angular, 187, 209
Cuanto, 48
Cuerpo negro:

espectro del, 308, 391
propiedades del, 306
Curie, el, 393

Chadwick James, 369
Choque elástico, 134
Choque inelástico, 134

Defecto de la masa en el núcleo, 375
Desintegración alfa, 400
teoría de, 408
Desintegración beta, 373, 412
inversa, 415
Desintegración de la serie de torio, 398
Desintegración de la serie del actinio, 400, 392, 396
Desintegración de la serie del uranio, 399
Desintegración gamma, 416
Desintegración mesónica y relatividad especial, 20
Desintegración radioactiva, 393
Deuterio,
como combustible termonuclear, 430
espectro del, 134
Deuterón:
energía de enlace del, 376
teoría del, 377
Diagrama de superficie límite:
de orbital atómico, 259
de orbital molecular, 262
Diamante:
estructura cristalina del, 328
estructura de banda del, 339
Difracción de partículas, 84
Dilatación del tiempo, 12, 14, 27
Dirac P. A. M., 207, 435
Distribución Boltzmann:
energías moleculares de la, 297
momentos moleculares de la, 299
Dualidad onda-partícula, 87, 96

Ecuación de onda, 143
Ecuación de Schrödinger: 145
dependiente del tiempo, 146
en estado estacionario, 149
para el átomo de hidrógeno,
para el deuterón,
el oscilador armónico, 165
para la partícula en una caja, 152
validez de la, 147
Efecto Auger, 237
Efecto Compton, 60
Efecto Doppler en la luz, 41, 42
Efecto fotoeléctrico: 44
teoría del, 48
y absorción de rayos gama, 66
Efecto mössbauer, 72
Efecto Zeeman, 189
anómalo, 207
Eigenfunción, 150
Eigenvalor, 150
Einstein, Albert, 10, 48
Electrodinámica cuántica, 202
Electrón:
como constituyente nuclear, 94, 368
deslocalizado, en la molécula de benceno, 271
momento magnético del, 190, 205
spín del, 205
teoría de Dirac, del, 435
Electronegatividad, 261
Electrones deslocalizados en las moléculas de benceno, 270
Elementos:
configuraciones electrónicas de los, 221
energías de ionización de los, 322
lantánidos, 217
tabla periódica de los, 218
transición de los, 217
transuránicos, 427
Elementos actínidos, 217
Elementos de transición, 217
Elementos lantánidos, 217
Elementos tierras-raras, 217
Emisión termoiónica del electrón, 49
Energía:
cinética, relativa al centro de masa, 422
cuantización de la, y ecuación de Schrödinger, 149
de enlace: de electrones atómicos, 215
del núcleo, 376, 386
incertidumbre en la medición de la, 95
reposo, 36
termonuclear, 427
Energía de cohesión de un cristal, 325
Energía de enlace:
del electrón atómico, 216
nuclear, 274, 385
Energía de Fermi, 336, 341
tabla de, 345
Energía de ionización, 321
tabla de, 322
Energía del punto cero del oscilador armónico, 163
Energía en reposo, 36
Energía termonuclear, 427
Energías moleculares en un gas, 297
Enlace:
covalente, 245, 326
hidrógeno, 331
iónico, 245, 323
metálico, 333
van der Walls, 329
Enlace covalente:
en el cristal, 328
en la molécula, 245
y el principio de incertidumbre, 249
Enlace iónico, 245, 324
Enlace metálico, 333
Enlace molecular, 245
Enlaces de hidrógeno en sólidos, 331
Equivalencia, principio de, 67
Espacio fase, 290
Espectro:
banda de, de la molécula, 120
de absorción, 121, 133
de emisión, 120, 133
de helio, 233
de hidrógeno 121, 129, 231
de los rayos X, 234
de mercurio, 234
de sodio, 232
del cuerpo negro, 307, 310
del sol, 121
Espectro:
electrónico, de la molécula, 283
rotacional, de la molécula, 274
Espectro atómico, (*ver* espectro),
Espectro de absorción, 121, 133
Espectro de emisión, 120
Espectro de las series de Balmer en el hidrógeno, 121, 130
Espectro de las series de Brackett en el hidrógeno, 122, 130
Espectro de rayos X, 234
Espectro electrónico de la molécula, 283
Espectro rotacional de la molécula, 274
Espectro vibracional de la molécula, 279
Espectrómetro de masa, 365
Espectrómetro de rayos X, 59
Estado base del átomo, 127
Estado de singulete del momento angular:
del átomo, 230
del helio, 235
del núcleo, 383
Estado de triplete del momento angular,
del átomo, 230
del helio, 235
del núcleo, 383
Estado excitado del átomo, 127
Estado metestable, 234
y el laser, 315
Estados de doblete del momento angular, 230
Estrellas:
blancas enanas, 375
producción de energía en, 427
Estrellas blancas enanas, 69, 375
Estructura fina en las líneas espectrales, 205, 209
Estructura hiperfina en líneas espectrales, 227, 375
Eter, 3, 9
Excitación atómica, 132
Experimento de Davison-Germer, 85
Experimento de Franck-Hertz, 133
Experimento de Geiger-Marsden, el, 104
Experimento de Michelson-Morley, 3, 7, 20
Experimento de Stern-Gerlach, 209

Factor de Boltzmann, 301, 312
Factor g de Landé, 240
Fermi, el, 374
Fermión, 214
Ferromagnetismo, origen del, 223
Fisión nuclear, 424
Fluctuaciones en el vacío del campo electromagnético, 202, 231
Fluorescencia, 283
Fórmula de dispersión de Rutherford, 113, 118
Fórmula de radiación de Planck, 309
Fórmula de Stirling para el logaritmo de un factorial, 293
Fórmulas relativistas, 37
Fosforescencia, 285
Fotón, 50
"masa" del, 67
Frecuencia angular de la onda, 81
Fuerza de intercambio, 437
Fuerza de van der Waals, 329
Fuerzas nucleares:
fuertes y débiles, 448
saturación de las, 372
teoría mesónica de las, 437
Función de Onda: 76, 142
antisimétrica,
compleja conjugada, 77
de la partícula en una caja, 153, 156, 158
del átomo de hidrógeno, 178, 183
del deuterón 383
del oscilador armónico 170
normalizada, 143
paridad de la, 453
simétrica, 213, 453
Función de onda antisimétrica, 213
y enlace covalente, 253, 254
Función de onda compleja conjugada, 77
Función de onda normalizada, 143
Función de onda simétrica, 213, 453
y enlace covalente, 251, 254
Función de trabajo de superficie, 49
Función nuclear, 427, 376

"Gas" de electrones en un metal, 333
distribución de energía en, 344
Goudsmit, S. A., 207
Gravitón, 447
Grupo de ondas, 81
velocidad de, 83
y principio de incertidumbre, 88

www.elsolucionario.org

h, 92, 185
Heisenberg, Werner, 92
Helio, niveles de energía del, 235
Hidrógeno:
  calor específico del, 287
  distribución de velocidades moleculares en el, 300
  espectro del, 231
  series espectrales del, 121, 130
Hidrógeno molecular iónico, 249
Hielo, estructura cristalina del, 333
Hipercarga, 449
Hiperón, 442

Impurezas en semiconductores, 340
Integral de Fourier, 90
Interacciones débiles, 448
Interacciones fuertes, 448
Interacciones fundamentales, 448
Inversión del tiempo, 454
Isómero, 417
Isótopo, 366

Kaon, 442

Laser, 313
Lepton, 447
Ley de distribución estadística de Bose-Einstein, 290, 308
  derivación de, 303
Ley de distribución estadística de Fermi-Dirac, 290, 312
  derivación de, 310
Ley de distribución estadística de Maxwell-Boltzmann,
  derivación de, 290, 295
Ley de Hooke, 160, 161
Ley de Moseley, 241
Ley del desplazamiento de Wien, 310
Ley periódica, 216
Ley Stefan-Boltzmann, 310
Líneas espectrales,
  efecto Zeeman en las, 191, 206
  estructura fina en las, 205, 209
  estructura hiperfina en las, 227, 375
  origen de las, 128
Longitud de onda Compton, 63
Longitud propia, 17

Magnetón de Bohr, 191, 209
Masa:
  atómica, 365
  efectiva, del electrón en un cristal, 357
  reducida: en el átomo de hidrógeno, 129
    en rotación molecular, 271
    en vibración molecular, 276
  relatividad de la, 30, 33
Masa efectiva del electrón en un cristal, 357
Masa reducida:
  del electrón en el átomo de hidrógeno, 131
  en rotación molecular, 271
  en vibración molecular, 276
Maser, 315
Mecánica cuántica, 141
Mecánica estadística, 289
Mecanismo de excitación y líneas espectrales, 133
Mendeleev, Dmitri, 217
Mercurio, niveles de energía del, 236
Mesón, 447
Metal, "gas" de electrones en, 333, 344
Método de Lagrange de multiplicadores indeterminados, 295
Modelo atómico de Bohr, 122
  efectos de movimiento nuclear en el, 131
  limitaciones del, 141
  y principio de correspondencia, 135
  y teoría cuántica del átomo, 195
Modelo atómico de Rutherford, 105
Modelo atómico de Thomson, 104
Modelo de capas del núcleo, 387
Modelo de gota líquida del núcleo, 384
  y fisión nuclear, 424
  y reacciones nucleares, 422
Modelo vectorial del átomo, 224
Modelos del gas de Fermi para el núcleo, 392
Moléculas, 245
  covalente polar, 261
  espectro electrónico de la, 283
  espectro rotacional de la, 274
  espectro vibracional de la, 279
  niveles de energía rotacional de la, 271
  niveles de energía vibracional de la, 277
Molécula de acetileno, 269
Molécula de amoniaco, 263, 266
Molécula de benceno, 270
Molécula de etileno, 268
Molécula de hidrógeno, 254
Molécula de metano, 263, 265
Molécula del agua, 262, 266
  estados vibracionales de la, 282
Molécula del dióxido de carbono, modos de vibración de, 282
Molécula del monóxido de carbono:
  espectro de la, 281
  niveles de energía rotacional de la, 270, 303
  niveles de energía vibracional de la, 277
Molécula polar, 261, 329
Moléculas de agua, enlaces de hidrógeno entre, 331
Momento angular:
  atómico, 185, 224
  molecular, 272
  nuclear, 388
  spín, 207

Momento angular molecular, 272
Momento magnético:
  del electrón atómico, 190
  del núcleo, 227
  del spín del electrón, 209
Multipletes de partículas elementales, 450, 456
Multiplicidad de estados del momento angular, 230
Muón, 441

Neptuno, 427
Neutrino: 413
  tipos de, 441
  trayectoria libre media del, 420
  y antineutrino, 436
  y energía estelar, 428
Neutrón, 368
  desintegración del, 369, 447
Nivel aceptante en un semiconductor, 341
Nivel donante en un semiconductor, 341
Niveles de energía:
  atómica, 127, 131, 223
  del átomo de helio, 233
  del átomo de hidrógeno, 127, 182, 232
  del átomo de mercurio, 234
  del átomo de sodio, 231
  del oscilador armónico, 162
  de una molécula en rotación, 271, 301
  de una molécula en vibración, 277
  de una partícula en una caja; 153
  nuclear, 370, 382, 387, 416, 423
  y espectro de rayos X, 234
Niveles de energía rotacional de la molécula, 271
  poblaciones relativas de, 301
Niveles de energía vibracional de la molécula, 277
Nuclear, fisión, 424
Nuclear, fusión, 427
Núcleo, 105
  ausencia de electrones en el, 94, 367
  componentes del,
  condiciones de estabilidad para el, 370
  desintegración radiactiva del, 393
  energía de enlace del, 375
  estados de momento angular del, 387
  forma del, 373
  modelo de capas del, 387
  modelo de la gota líquida del, 384
Núcleo,
  modelo del gas de Fermi del, 392
  momento magnético del, 227, 368
  niveles de energía del, 370, 387, 383, 416, 423
  spín del, 368
  tamaño del, 114, 373, 411
Nucleón, 370

Núcleos compuestos, 421
Núclidos, 366
Número atómico, 107
Número cuántico:
  de la órbita de Bohr, 126
  de spín magnético, 209
  de una partícula en una caja, 153
  del spín del electrón, 207
  magnético, 181
  nuclear, 388
  orbital, 181
  principal, 182
  rotacional, 272
  vibracional, 277
Número cuántico del spín magnético, 208, 450
Número cuántico magnético, 181, 186
Número cuántico orbital, 181, 182
Número cuántico principal, 182
Número cuántico rotacional, 272
Número de extrañeza, 448
Número de ocupación, 312
Número de onda, 81
  del electrón en una red cristalina, 346
Números mágicos en la estructura nuclear, 387

Ondas de De Broglie, 75
  difracción de, 84
  en el átomo de hidrógeno, 122
  longitud de onda de las, 76
  reflexión de Bragg, 347
  velocidad de fase de las, 79, 83
  velocidad de grupo, 84
Operaciones de simetría y principio de conservación, 452
Orbital:
  atómico, 256
  híbrido, 263, 265
  molecular, 256
Orbital híbrido, 263
Orbital molecular, 256
  diagrama de superficie-límite del,260
Orbitas atómicas, 256
Orbitas del electrón en el átomo de hidrógeno, 115
Ortohelio, 236
Oscilador armónico:
  energía del punto cero, 163
  funciones de onda del, 163
  niveles de energía del, 162
  teoría clásica del, 161
  teoría cuántica del, 165
Oxígeno, distribución de velocidades moleculares en el, 340

Paradoja de los gemelos, 16
Parahelio, 236

Parámetro de impacto en dispersión atómica, 107
Paridad, 453
Partícula alfa, 104
Partícula en una caja:
  funciones de onda de una, 156,
  niveles de energía de una, 153
  teoría cuántica de una, 152, 158
Partículas elementales:
  multipletes de, 449, 455
  tabla de, 446
  teoría de las, 455
    actinio, 217
Pauli, Wolfgang, 212, 413
Penetración de barrera, teoría cuántica de la, 161, 403
Peso estadístico de los niveles de energía, 301
Pion 440
Planos de Bragg en un cristal, 57
Plutón, 427
Polinomios de Hermite, 170
Positrón, 414, 436
Principio de correspondencia, 135
  y oscilador armónico, 163
Principio de exclusión, 212
  repulsión debida a, 245
Principio de incertidumbre, 91
  e intervalos, 95
  y enlace covalente, 248, 249
  y espacio fase, 290
  y la partícula en una caja, 154, 158, 159
  y medición de la energía 95
  y momento angular, 100, 188
  y resonancia de partículas, 445
  y teoría mesónica de las fuerzas nucleares, 439
Principios de conservación y operación de simetría, 452
Probabilidad de densidad, 77
Producción de pares, 64
Protón, 366

Quark, el, 455

Radio atómico, 323
Radio de Bohr del átomo de hidrógeno, 127
Rayos cósmicos, 20, 441
Rayos gamma, 66
Rayos X, 51
  absorción de, 66
  difracción de, 57
  dispersión de, 67
Razón giromagnética:
  del electrón atómico, 191
  del spín del electrón, 209
Reacción en cadena, 427
Reacciones nucleares, 421
Reacciones nucleares del ciclo del carbono, 428
Reflexión de Bragg:
  de las ondas de De Broglie, 347, 348
  de rayos X, 57
Regla de Hund, 223, 229, 262
Reglas de selección:
  para espectros atómicos, 200
  para espectros rotacionales, 274
  para espectros vibracionales, 278
Relación masa-energía, 35, 37
Relatividad:
  teoría especial de la, 10
  teoría general de la, 67
Resonancia de la partícula, 444
Resonancia del ciclotrón en sólidos, 361
Roentgen, Wihelm, 51
Rydberg, el, 216

Sección transversal, 111, 417
Semiconductor, 340, 354
Semiconductor del tipo n, 341
Semiconductores tipo p, 341
Serie de desintegración del Neptuno, 398
Serie de Paschen en el espectro del hidrógeno, 122, 130
Serie de Pfund en el espectro del hidrógeno, 122, 130
Series espectrales, 121
Serie de Lyman en el espectro de hidrógeno, 123, 129
Series radioactivas, 397
Significado de la vida media: del estado excitado, 424
  del radioisótopo, 394
Símbolo del estado atómico, 231
Simultaneidad y relatividad, 15
Sistema de coordenadas del centro de masa, 423
Sistema inercial de referencia, 10
Sodio:
  estructura de bandas del, 335
  niveles de energía del, 232
Sólido amorfo, 320
Sólidos, cristalinos y amorfos, 319
Spín:
  de partículas elementales, 446
  electrón, 207
  isotópico, 450
  neutrino, 413, 436
  nuclear, 368, 388
Spín isotópico, 450
Subcapa:
  cerrada, 219
  electrón atómico, 215
  orden en que se llena, 219
Suma de velocidades, relativista, 28
Superficie de Fermi, 357

Tabla periódica, 218
Teorema de Unsöld, 208
Teoría cuántica:
  de la luz, 48
  de la partícula en una caja, 152
  de la penetración de barrera, 159, 403
  de transiciones radiativas, 198
  del átomo de hidrógeno, 192
  del deuterón, 377
  del oscilador armónico, 165
Teoría de banda de los sólidos, 336, 350, 354
Teoría general de la relatividad, 67
Teoría mesónica de las fuerzas nucleares, 437
Tiempo propio, 12
Tipos de cristal, tabla de, 335
Transformación de Lorentz de las coordenadas, 22, 26
  inversa, 27
Transformaciones galileanas de las coordenadas, 22, 23
Transformada de Fourier, 90
Transiciones radiativas, 198
  permitidas y prohibidas, 201
Transiciones, radiactivas: permitidas y prohibidas,
  espontáneas e inducidas, 202
  teoría cuántica de las, 200
Trayectoria libre media, 419
Tritio, 366

Uhlenbeck, G. E., 207
Unidad de masa, atómica, 365

Valor de expectación, 147
Velocidad:
  de fase, 83
  de grupo, 83
Velocidad cuadrática media de la molécula, 300
Velocidad de fase de las ondas, 83
Velocidad de grupo de las ondas, 83
Velocidad molecular cuadrática media, 300
Vida media, 394
Von Laue, Max, 53

Yukawa, Hideki, 438

Zona de Brillouin, 349

www.elsolucionario.org